

ÚJABB ANYAGTUDOMÁNYI NOBEL-DÍJ: DAN SHECHTMAN ÉS A KVÁZIKRISTÁLYOK FELFEDEZÉSE

Hargittai István
BME és MTA

A 2011-es kémiai Nobel-díjat *Dan Shechtmann*nak, a Technion – az Izraeli Műszaki Egyetem (Haifa) – professzorának ítélték oda a kvázikristályok felfedezéséért.¹ Kevés annyira egyértelmű és elégedetlenséget alig kiváltó kitüntetés volt a közelmúltban a Nobel-díjak körében, mint ez. Néhány kérdés mégis felvetődik. Először azonban beszéljünk arról, ami vitathatatlan.

A felfedezés elismerése egyértelműen megfelel *Alfred Nobel* végakarátának, amely szerint a kémiai Nobel-díjat a legfontosabb kémiai felfedezésért vagy

tökéletesítésért kell odaítélni. A kvázikristályok felfedezése egyértelműen felfedezés volt, ugyanakkor a kristályokról alkotott elképzeléseink fontos tökéletesítése is. Az természetesen vitatható, hogy éppen melyik felfedezés a legfontosabb, és nagyon sok felfedezés marad Nobel-elismerés nélkül, de a kémiai Nobel-díjak körében aligha találhatunk arra nem érdemes kitüntetettet a díj egész története során. Vitathatatlan az is, hogy a felfedező Dan Shechtman volt.

Shechtman, aki már akkor is a Technion munkatársa volt, 1982-ben vendégkutatóként dolgozott az USA Nemzeti Szabványügyi Hivatalában (National Bureau of Standards, NBS). Ez a hivatal nemcsak szabványok ügyintézésével foglalkozott, hanem jelentős kutatási tevékenységet is folytatott. Shechtman tanulmányainak szponzora az amerikai védelmi kutatási szervezet volt, amelynek képviselője arra biztatta Shechtmant, hogy munkájában bátran kalandozzon el bármilyen irányba, amerre csak kíváncsisága elvezeti. Shechtman hasznos tulajdonságú új ötvözeteket

¹ A kvázikristályok felfedezésének történetéről részletesen írtunk a következő könyvben: Hargittai I., Hargittai M.: *Szimmetriák a felfedezésben* (Budapest: Vince Kiadó, 2003, 148–182.). 2011 októberében megjelent új könyvünk részletesen tárgyalja a kvázikristályok felfedezését különös tekintettel Shechtman kutatói tulajdonságaira, amelyek elvezették felfedezésének elfogadtatásához és elismertetéséhez: I. Hargittai, *Drive and Curiosity: What Fuels the Passion for Science*. (Amherst, New York: Prometheus Books, 2011, 155–172.). A könyv *Ambíció és kíváncsiság* című magyar fordításának megjelenése az Akadémiai Kiadónál 2012 tavaszára várható.

keresett és elsősorban elektronmikroszkópiával vizsgálta mintáit.

Gyorshűtött alumínium-vas ötvözeteket állítottak elő, amelyekről hasznos alkalmazásokat reméltek. Érdekesnek mutatkozott egy metastabil Al_6Fe fázis összehasonlítása az összetételében hasonló, de stabil Al_6Mn rendszerrel. Ezen minták vizsgálata során hamarosan eljutott olyan összetételű alumínium-mangán ötvözetekhez, amelyeket már nem volt érdemes kutatni, mert a tapasztalat szerint annyira törekenyek voltak, hogy alkalmazásukra nem számíhattak. Ennek ellenére – és ez mutatja a kutatói kíváncsiság szerepét ebben a példában – Shechtman nem tudta megállni, hogy egyre nagyobb mangántartalmú mintákról is készítsen elektronmikroszkópos felvételeket, amelyek mindig együtt jártak elektrondiffrakciós kép megjelenítésével. A 25%-os mangántartalmú minta különös diffrakciós képet mutatott tíz jól kivehető fényes folttal, ami tízes szimmetriájú szerkezetre utalt – nyilvánvaló lehetetlenség a szilárd fázisban. Egy, a dogmáknak jobban hitelt adó kutató gyorsan továbblépett volna és senkivel sem osztotta volna meg ezt a megfigyelést, de Shechtman nem ilyen volt. Hitt a saját szemének és beírta a laboratóriumi jegyzőkönyvébe, hogy a 1725-ös Al-25%Mn minta tízfogású szimmetriát mutat. Három kérdőjellel utalt a meglepetésére. Ezután kirohant a folyosóra, hogy valakinek – bárkinek – megmutassa azt, amit látott. Nem volt ott senki és akkor visszaült az elektronmikroszkóphoz és elvégzett minden olyan kísérletet, ami a továbbiakban már elegendő is volt ahhoz, hogy közleményben számoljon be felfedezéséről. Mire azonban közleményt jelentetett meg felfedezéséről, több mint két év telt el.

A felfedezést követő hosszú hónapokban Shechtman igazi kálváriát járt be amiatt, hogy mindenkit meg akart ismertetni azzal, amit látott, de senki sem hitte el azt, hogy ez megtörténhetett. A kedvesebbek visszaküldték az iskolapadba, ami felesleges lett volna, mert egyetemi éve alatt egyik vizsgáján be is kellett bizonyítania, hogy ötös szimmetria nem létezik a szilárd fázisban, és ezt sikeresen meg is tette. A kevésbé jóindulatúak kigúnyolták. Nem tudott a brit kristallográfus *Alan Mackay* (Birkbeck College, London) megállapításairól, arról hogy az ötös szimmetria elképzelhető (lásd alább) és nem ismerte szimulációs felvételeit, amelyek segíthették volna. Különösen megnehezítette dolgát, hogy az akkori idők legnagyobb kémikusa, *Linus Pauling*, aki a kristallográfiában is otthon volt és az ötös szimmetriájú ikozaédes szerkezetek kutatásában jelentős eredményei voltak, kategorikusan elutasította Shechtman felfedezésének érvényességét. Nem a kísérleti megfigyelés tényében kételkedett, hanem értelmezésében. Váltig állította, hogy kristallográfiai jelenség, legnagyobb valószínűséggel ikerkristályosodás okozhatta a tapasztalt diffrakciós képet. Shechtmannak még munkahelyein is nehézségeket okozott állhatatossága, mert mind amerikai, mind pedig hazatérte után haifai főnökei kínosnak találták, hogy a mindenki által elfogadott tanok ellenébe megy.



Dan Shechtman és Alan Mackay Budapesten Hargittaiéknál 1995-ben. Mindketten részt vettek a Farkasné Jahnke Mária által szervezett balatonfüredi nemzetközi kvázikristály szimpóziumon. Hargittai István felvétele (© 1995 Hargittai István).

Azután akadt egy izraeli kristallográfus, *Ilan Blech*, aki elfogadta Shechtman értelmezését és attól kezdve már együtt keresték a pontosabb elméleti magyarázatot. Majd 1984 nyarán az NBS egyik nagytekintélyű vezető kutatója, *John Cahn* – aki korábban idegesen eltanácsolta Shechtmant anélkül, hogy komolyan meghallgatta volna – végre belátta, hogy igaza van, noha még nem tudta megfelelően megfogalmazni felfedezését. Most már valóban csak az maradt hátra, hogy meggyőző dolgozatban írják le a felfedezést és ehhez még egy francia matematikai kristallográfus, *Denis Gratias* is bevontak a munkába. Dolgozatuk 1984 novemberében jelent meg.² Azonnal átütő sikert aratott, ami több ezer(!) publikáció megjelenésében nyilvánult meg a következő években. Ez azért is figyelemreméltó, mert korábban Shechtman egy cikkpróbálkozását egy alkalmazott fizikai folyóirat szerkesztője azzal utasította el, hogy a téma nem érdekelne a fizikusokat.

Fontos még hozzátenni, hogy bármennyire is vonzó a kvázikristály elnevezés, amelyet egyébként *Dov Levine* és *Paul Steinhardt* adtak ezen szerkezeteknek, a kvázikristályok többé már nem „kvázik”. A felfedezés által okozott paradigmaváltás részeként a Nemzetközi Kristallográfiai Unió megváltoztatta a kristály meghatározását. Korábban a kristályokat szabályos és periodikus szerkezetként definiálták (szemben a nem-szabályos és nem periodikus amorf anyagokkal). A kvázikristályokat szabályos és nem-periodikus szerkezetekként lehetne leírni, de az új definíció szakított a szerkezeti jellemzéssel és a fenomenológikus utat választotta. Ma kristálynak nevezünk minden olyan szerkezetet, amely Bragg-féle diffrakciós képet okoz.

Fentebb már utaltam arra, hogy kérdések is felvetődnek ezzel a Nobel-díjjal kapcsolatban. Ilyen kérdés, hogy miért *kémiai* Nobel-díjjal ismerték el a kvázikristályok felfedezését? Valóban, a 2010-es fizikai

² D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* 53 (1984) 1951–1953.



Hargittai István és Dan Shechtman 2011 januárjában az Izraeli Műszaki Egyetemen (Technion, Haifa) a Shechtman hetvenedik születésnapja tiszteletére rendezett szimpózium alkalmából. Mindkettőjük nyakkendőjét kváziperiodikus minta díszíti (© 2011 Hargittai István).

Nobel-díj példájára, amelyet a grafén előállításáért ítéltek oda, a kvázikristályok felfedezését is jutalmazhatták volna fizikai díjjal. Ez azonban megfordítva is igaz, a grafént is lehetett volna kémiai tekinteni. Mindkettő az anyagtudományok körébe esik és ennek megfelelően a fizika és a kémia közötti határterületen helyezkedik el. Mindkét tudományág számára fontos az anyagtudomány hovatartozása és az elmúlt években bizonyos rivalizálást is lehetett ebben érzékelni. Így például a kémikusok nem örülhettek annak, hogy az Academia Europaea a fizikához sorolta az anyagtudományt. Ebből a szempontból demokratikus megoldás volt a grafén és a kvázikristályok megosztása a kétféle Nobel-díj között és ez nem lehetett a véletlen műve, ismerte a Fizikai Nobel-díj Bizottság és a Kémiai Nobel-díj Bizottság szoros együttműködését. Shechtman Nobel-díjának kémiai odaítélése abból a szempontból is szerencsés, hogy Linus Pauling személyén keresztül éppen a kémia oldaláról voltak nehézségek a felfedezés elismertetésében, amit a mostani díj némiképpen feledtetni hivatott. Azon egyébként nem kell csodálkoznunk, hogy most már nem először kifejezetten anyagtudományi felfedezést jutalmaznak Nobel-díjjal annak ellenére, hogy nincs anyagtudományi kategória a Nobel-díjak között. Biokémiai sincs, és hosszú ideje a kémiai és az orvosi Nobel-díjak mintegy negyven százalékát biokémiai felfedezések kitüntetésére fordítják. Szerencsére a Nobel-díj intézménye rugalmasan és a tudományos fejlődéssel lépést tartva értelmezi a tudományos diszciplínákat. A természet nem szigorúan az iskolai tárgyak szerint alakult ki és fejlődött, a mi felosztásunk csak gyakorlati-kényelmi szempontokat követett, amit a tudományos fejlődés állandóan felülír.

Ugyancsak kérdés lehet, hogy mennyiben igazságos az, hogy *egyedül* Shechtmant tüntették ki? Erre a kérdésre a választ legkézenfekvőbb úgy keresni, hogy megvizsgáljuk, kik jöhettek volna még szóba. A tudománytörténetben visszamehetnénk korábbi próbálkozásokhoz is, amikor a kutatók, Johannes Keplertől elindulva, de még művészek is, Albrecht Dürertől kezdve keresték az ötös szimmetria megjelenését periodikus szerkezetekben. *J. D. Bernal* vette fel először az úgynevezett általánosított krisztallográfia fogalmát, amellyel elindította a szerkezetek tudományának megteremtését. Az általános krisztallográfia nem szorítkozott volna a klasszikus krisztallográfia zárt rendszerére és nem zárta volna ki az ötös szimmetria megjelenését kiterjedt szerkezetekben sem. Reálisabb azonban *Roger Penrose*-ra gondolni, aki szinte unalomból űzött rajzolgatással jutott el a Penrose-féle aperiodikus síkmintákhoz, aminek azonban nem ismerte fel esetleges tudományos következményeit. Ezekből a mintákból állított elő azután a Bernal-tanítvány Alan L. Mackay szimulációval tízes szimmetriát mutató diffrakciós képet, amelyet 1982-ben meg is jelentetett. 1982 szeptemberében az akkori Kémiai-szerkezeti Kutatólaboratórium (KSzKL) szervezésében, az ELTE TTK Puskinutcai F épületében tartott előadásában Mackay arra figyelmeztetett, hogy létezhetnek ötös szimmetriájú kiterjedt szerkezetek, de ha nem hiszünk abban, hogy előfordulhatnak, még akkor sem fogjuk észrevenni őket, ha a szemünk elé kerülnek.³ Ennél a figyelmeztetésnél azonban tovább nem lépett. Végül pedig Dov Levine és Paul Steinhardt (akkor a Pennsylvania Egyetem fizikai tanszékén) modellt dolgoztak ki hosszútávúan rendezett aperiodikus szerkezetekre, amelyeket kvázikristálynak neveztek el, de óvakodtak attól, hogy elméleti megfontolásaikat megjelentessék, mert nem akarták kitenni magukat a kutatói társadalom bírálóinak, amennyiben a tudományos közösség számára az ötös szimmetria lehetlensége kiterjedt szerkezetekben kőbe vésett dogma volt.⁴ Ha ekkor Levine és Steinhardt nem az íróasztaluk számára készítik tanulmányukat, hanem bátran előállnak vele, lehet, hogy most őket is jobban ünnepelnénk. Az előbbieket fényében azonban nem lett volna indokolt Penrose-zal, Mackay-jel, vagy Levine-nel és Steinhardttal megosztani Shechtman kitüntetését.

³ Mackay meghívását azért kezdeményeztük, mert érdekes következtetlenséget éreztünk abban, hogy a molekulák világában semmi-féle szimmetriakorlátozás nincs, míg a kristályok világában – legalábbis a klasszikus krisztallográfia tanítása szerint – fontos korlátozások voltak. Mackay addigi eredményei az ikozaéderez szerkezetek kutatásában arra utaltak, hogy tőle várható az ellentmondás feloldása.

⁴ Levine doktorandusz volt Steinhardt mellett és ennek megfelelően inkább Steinhardt döntése volt eredményeik visszatartása. Cikküket végül Shechtman felfedezésének ismeretében jelentették meg, mindössze hetekkel követve Shechtman és társszerzői dolgozatának megjelenését: D. Levine, P. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* 53 (1984) 2477–2480. Ma Levine a Technion fizikaprofesszora, Steinhardt pedig a Princeton Egyetem fizikaprofesszora.