

EGY KÍSÉRLET, AMELY MEGVÁLTOZTATTA A TERMÉSZETTUDOMÁNYOK FEJLŐDÉSÉT

Bombicz Petra, Kálmán Alajos
MTA Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

Az utóbbi évek gyakorlatát¹ folytatva, az ENSz a 2014-es évet a *Krisztallográfia Nemzetközi Évének* nyilvánította. A Nemzetközi Krisztallográfiai Unió (International Union of Crystallography, IUCr) együttműködve az UNESCO-val nemzeti és nemzetközi rendezvényekkel, konferenciákkal, az alkalomhoz illő kiadványokkal stb. emlékezik meg azokról a tudomány történetében fordulópontot jelentő felfedezésekről, amelyek 1912 áprilisában kezdődtek és az elkövetkező pár évben (1912–1920) megváltoztatták az anyagi világról alkotott tudásunkat. A szilárd kristályokat felépítő atomok (kisebb és nagyobb molekulák) létezése elvont fikcióból mérhető, számokban kifejezhető egzakt ismeretté vált.

A centenáriumi ünnepek legfontosabb eseményei a röntgen-krisztallográfia 1912-ben történt születéséről való megemlékezés és az évszázadokra visszanyúló, a kristályokkal kapcsolatos munkákkal összegyűjtött ismeretek felelevenítése, seregszemléje. A következőkben a modern krisztallográfia kialakulásának rövid történeti áttekintése után beszámolunk a Krisztallográfia Nemzetközi Éve nyitóünnepségéről.

A civilizáció fejlődésének egyik fontos kísérője volt az emberi környezetben fellelt kristályos anyagok felismerése, gyűjtése, majd különböző formában történő hasznosítása. A „korai adatgyűjtés” hosszú, több évszázados periódusa után *Georgius Agricola* (német orvos) már 1556-ban szín, átláthatóság, csillogás, keménység, hajlékonyság, illetve hasadás szerint osztályozta az ismert, *ásványoknak* (minerals) nevezett, alakjukat megőrző szilárd anyagokat. A gyarapodó

¹ 2009 a csillagászat, 2010 a Földbolygó, míg 2011 a kémia nemzetközi éve volt.

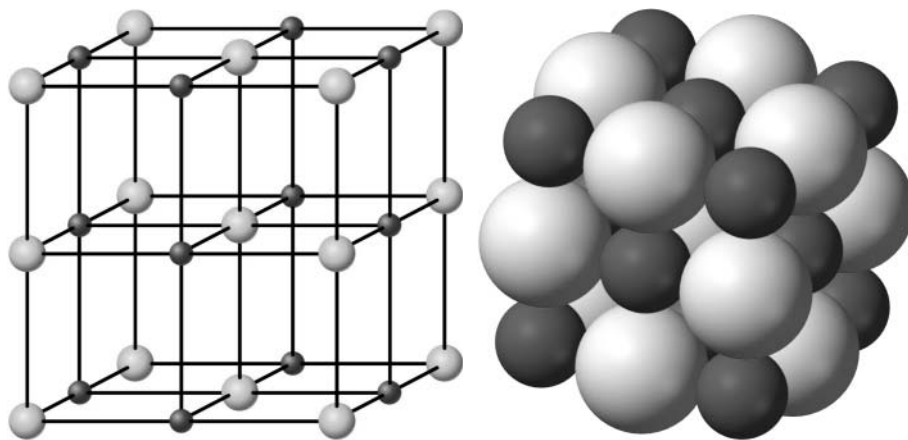
megfigyelések alapján *Niels Stensen* (dán természetbúvár) ismerte fel (1669), hogy a kristályokat (konvex poliéderek) körülzáró síkok különböző szimmetriákkal jellemezhetők és az általuk bezárt szögek a lapok méretétől függetlenül állandóak. A *lapszögek állandóságának* törvényét követve, szögmérővel, majd optikai goniométerrel elvégzett szögmérések vezettek a felismeréshez, hogy tükrözések, továbbá forgástengelyek (gírek) által összekapcsolt lapformák hét tengelykeresztben értelmezhetők (*Christian S. Weiss* 1815, majd *Friedrich Mohs* 1825). Az inverzió ($\bar{1}$) kombinálása a gírekkel (2, 3, 4, 6) három újabb szimmetria műveletet eredményez: $\bar{2} = m, \bar{3}, \bar{4}$). Ha a nyolc műveletet a hét rendszernek elnevezett tengelykeresztben (triklin, monoklin, rombos, trigonális, tetragonális, hexagonális és szabályos) értelmezzük, 32 kristályosztályhoz (más néven pontcsoport) jutunk, amit először *Johann Hessel* írt le (1830). Ez egyben a kristályok vizuális leírásának, karakterizálásának határát jelentette. Ezt tekintjük a klasszikus kristálygeometriának.

A morfológiai vizsgálatok természetesen folytatódtak. *René Just Haüy*-t a kalcit (CaCO_3) kitűnő romboéderes hasadásának tanulmányozása vezette (1784) egy újabb mérföldkövet jelentő felismeréshez. Szerinte a folytatólagos hasítás – legalábbis elvileg – oly apró paralelepipedonokra vezethet, amelyek sem szemmel, sem nagyítóval nem láthatók. Elméletében a kristályok legapróbb részei (*molécules intégrantes*) az illető kristályra jellemző alakú elemi paralelepipedonok, s ezek szoros illeszkedéséből épül fel a kristály. A *molécules intégrantes* alakja az illető kristályrendszer legegyszerűbb formájának felel meg. Haüy elméletéből kiindulva *Gabriel Delafoss* (1840) kimondta, hogy a *molecules intégrantes* fizikai, illetve kémiai jellemzőktől független geometriai elem. 1848-ban *Auguste Bravais* a 32 kristályosztály ismételt levezetése mellett 14 térrácsot javasolt. A spekulatív (azaz vizuálisan nem igazolható) rácselmélet alapja a transzlációval létrehozott végtelen pontsor. A pontsor ortogonális vagy nem ortogonális (oblique) transzlációjával történő megsokszorozása adja a síkrácsot. A síkrácsok azonos távolsággal történő egymásra helyezése adja a térrácsot, amelynek egysége az elemi cella. A három dimenzióban értelmezett pontsorok ortogonalitása, illetve annak hiánya alapján kimutatta, hogy a 14 rács hét különböző rácsszimmetriát foglal magában. Ezek a korábban felismert hét kristályrendszer *primitív* elemi cellái. A további hét úgynevezett *centrált* rács pedig úgy jön létre, hogy a primitív cellák (például triklin vagy monoklin) társításával (2 vagy 4 cellát felhasználva) a megnövelt térfogatban további szimmetriaműveletek értelmezhetők. Bravais *transzlációkra* épülő térrácsa a tércsoportelmélet előfutára. *Leonhard Sohncke* 1879-ben két új szimmetriaelemet ismert fel: a csavartengelyt és a csúszósíkot. Ezt követően az orosz *E. S. Fedorov* elsőként vezette le (1885) a 230 tércsoportot. Fedorovtól függetlenül ugyanerre az eredményre jutott *Arthur Schönflies* német matematikus (1891), majd harmadikként az angol *William*

Barlow, aki modellkísérletek alapján közölte (1883) öt köbös rendszerű kristály, köztük a kősó szerkezetét. Sohncke ezek helyességét megkérdőjelezte. Barlow válaszként ugyancsak levezette a 230 tércsoportot (1894). Azonban ez is kevés volt az utolsó fő kérdés megválaszolására, hogy az elemi cellában hogyan rendeződnek el az atomok.

Időközben a lapszögek optikai méréséből levezetett, a hét rendszerre (triklin \rightarrow szabályos) jellemző kristálytani tengelyarányok (és pontos hajlásszögek) a gyarapodó *kémiai ismeretek* birtokában ugyancsak értékes felismerésekhez vezettek. 1809-ben *W. H. Wollaston* lapszögmérésekből felismerte, hogy a kalcit, a magnezit és a sziderit (Ca-, Mg-, Fe-karbonátok) kissé eltérő méretű síkokkal határolva romboéderes kristályok alakjában kristályosodnak. 1819-ben *Mitscherlich* megállapította, hogy bizonyos sópárok, mint a KH_2PO_4 , KH_2AsO_4 , $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ és $\text{NH}_4\text{H}_2\text{AsO}_4$ hasonló kémiai összetétel mellett azonos kristályformákban növekednek. A különbség egy atom cseréje egy másikkal. Ezeket a párokat *izomorfnak* nevezte el. E felismerés haszna a kémiában jelentkezett, *Berzelius* (Mitscherlich tanára) a szelén atomsúlyát a Na_2SO_4 , Ag_2SO_4 , Na_2SeO_4 és az Ag_2SeO_4 izomorfiája alapján határozta meg. Ugyancsak Mitscherlich ismerte fel (1821), hogy a kalcit és az aragonit azonos kémiai összetétel (CaCO_3) mellett kristályformájukban (romboéderes, illetve rombos) és fizikai tulajdonságaikban különbözőek. A polimorfjának elnevezett jelenség a 20. század hatvanas évei óta folyamatosan az ipar (festék, gyógyszer és robbanószer) érdeklődésének középpontjában áll.

Az 1870-es évektől *Paul von Groth* fejlesztette tovább az izomorfia kritériumára vonatkozó ismereteket, és egyebek között megállapította, hogy a szerves kristályok izomorfiája különbözik Mitscherlich szeretlen sóinak izomorfiájától. Optikai mérésekkel (1870–1919) szerves kristályok ezreinek határozta meg a pontcsoportját. A pontosan mérhető hajlásszögek mellett a kristálytani tengelyeknek csak az arányát határozhatta meg. Ezért a vizsgált szerves vegyületek molekulatömegét elosztotta a mért sűrűséggel, majd a tengelykereszteket ezzel a molekulatérfogattal (V^*) normálta. Erre alapozva kísérlete meg atomokkal (Cl, Br, I), illetve atomcsoportokkal (CH_3 , C_2H_5 , NO_2 stb.) történő hidrogénszubsztitúció kémiai rokon kristályokra való morfológiai hatását leírni. Az észlelt alakváltozást morfortrópiának nevezte. Mivel Groth becslései a kristályosztályok és a tengelyarányok ismeretére korlátozódtak, módszerének alapvető korlátja a molekulatérfogad alkalmazása. Csak a röntgenkristallográfia deríthette ki, hogy a tényleges elemi cella-térfogatok (V) 1,66 Z -vel nagyobbak Groth V^* értékeinél, azaz a kristály tércsoportjától függően az elemi cellában egynél több molekula is lehet. Ezek számát Z adja meg. Így természetesen 1912 előtt Groth nem ismerhette a primitív és a (lapon)centrált rácsok tényleges különbségét sem. Ezért azután *Sommerfeld* doktoranduszának, *Paul Peter Ewald*nak a fény optikai kettőtörésének számításaihoz Groth a



1. ábra. A kősz szerkezete.

W. L. Bragg hamarosan a máig használt Bragg-egyenletben praktikus okból a beesési szöveget pótiszögével (θ) helyettesítette, így $n\lambda = 2d\sin\theta$, ahol d a rácsállandó. Ebből a felírásmódból válik láthatóvá a diffrakciós kép archimédeszi fixpontja: a diffraktált sugár (s) mindig 2θ szöget zár be a primer (s_0) sugárral. W. L. Bragg felismerte, hogy egy szépen fejlett kristálylapon tükrözött röntgensugárzás eltérítésének szögét (2θ) megfelelő detektorral (ionizációs

modellként választott anhidrit (CaSO_4) rácsát primitívnek adta meg. Szerencsére ugyanezen időben Ewald és Max von Laue találkozása (München) és konzultációja 1912 áprilisában elvezetett az utóbbi nevével világhírt nyert kísérlethez.

Ehhez azonban a röntgensugárzás felfedezése (1895) is kellett, amelynek valódi természetéről, bár a kérdéssel foglalkozók közül többen is kaptak Nobel-díjat (Wilhelm Conrad Röntgen, Charles Glover Barkla, Wilhelm Wien) 1912-ig csak ellentmondó sejtések voltak. A történelmi jelentőségű Laue-kísérlet azután egyszerre igazolta az X-sugárzás hullámtermészetét, interferenciája pedig a kristályok rácsszerkezetét. Ebből kiindulva William Henry Bragg és William Lawrence Bragg (apa és fia), a Barlow–Pope féle modellek segítségével már 1912 végéig értelmezték az első kristályokról (NaCl, KCl stb.) készült röntgenfelvételeket, többek között kimutatva, hogy Barlow spekulatív szerkezeti modelljei közül csak a gyémánt volt hibás.

A röntgensugár kristályon bekövetkező interferenciájának geometriai feltételét Laue a három dimenziós rács t_1 , t_2 , t_3 translációjának megfelelően három egyenlettel írta le, amelyek jobb oldala rendre a sugárzás λ hullámhossza, illetve annak felharmonikusai $m\lambda$, $p\lambda$ és $q\lambda$. E hosszúság dimenziójú mennyiségek trigonometrikus kapcsolata nem segített az atomi méretek felderítésében, elsősorban a röntgensugár hullámhosszának meghatározásában. Ugyanez a helyzet Ewaldnak a diffrakciós kép reciproktérben történő rendkívül szemléletes leírásával. Ezen a 22 éves William Lawrence Bragg segített. A Cambridge Philosophical Society 1912. november 11-én tartott ülésén Bragg *The Diffraction of Short Electromagnetic Waves by Crystals* című dolgozatát J. J. Thomson mutatta be. Bragg brilliáns matematikai felkészültséggel mutatott rá Laue tévedéseire, többek között arra, hogy a köbös ZnS szerkezetének felállításában hol és miben tévedett. A diffrakció jelenségét egyszerűen leíró és ebben zseniális probléma kezelése abban áll, hogy síkokba rendezett atomokat egymástól azonos távolságú (d) párhuzamos tükröknek tekintette. Az ezekről, adott beesési szögek (α) mellett tükröződő nyalábok akkor erősítik egymást maximálisan, ha útkülönbségük a hullámhossz egész számú többszöröse, matematikailag megfogalmazva $n\lambda = 2d\cos\alpha$.

kamra) mérve, továbbá a tükrözésre használt kristálylap rácsállandóját (d) ismerve, a röntgensugár hullámhossza meghatározható. W. L. Bragg már tudta, hogy a kősz köbös laponcentrált rácsában négy NaCl ($Z = 4$) alkotja az elemi cellát, így annak térfogata a sűrűség (ρ) ismeretében kiszámítható.

$$V = 1,66 \frac{MZ}{\rho},$$

ahol M a NaCl moláris tömege, 1,66 pedig az Avogadro-számnak ($6,0228 \cdot 10^{23}$) a dimenzió rendezése utáni maradéka. A kocka élhossza a térfogat köbgyöke, és ennek fele az analizátor kristályának d értéke (1. ábra). Történelmi jelentősége, hogy ez az első kísérleti úton meghatározott (Na-Cl) atomtávolság. Ezzel megnyílt a kísérleti röntgenkristallográfia diadalútja: az atomok és az általuk képzett vegyületek, molekulák mérete az ember alkotta hosszúságskálán (nm, Å, pm) értelmezhetővé vált. Mivel a kősz higroszkópos, hamarosan áttértek a tiszta, jól kristályosuló kalcitra, amelynek romboédere hajlásszögét ($46^\circ 7'$) optikai goniométerrel kellő pontossággal kimérhették.

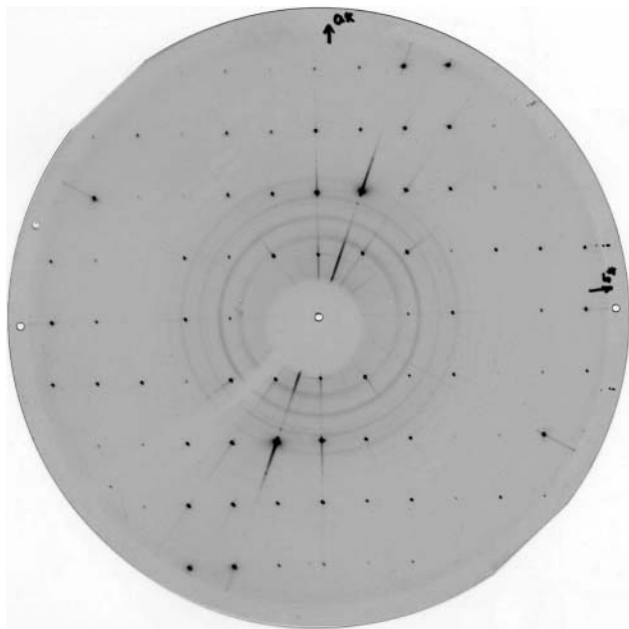
Ha az $1/\lambda$ modulusú primer (s_0) és diffraktált sugár (s) által bezárt 2θ szög alkotta egyenlő szárú háromszögből az átfogót,

$$S = \frac{2}{\lambda} \sin\theta,$$

míg a Bragg-egyenletből a rácsállandót

$$\frac{1}{d} = \frac{2}{\lambda} \sin\theta$$

kifejtjük, kitűnik, hogy a θ -val a 0 és $2s_0$ között változó S -vektor reciproka a rácsállandónak. Az általa alkotott vektorteret Ewald után reciproktérnek nevezzük (2. ábra). Amint azonban arra Ernest Rutherford (kémiai Nobel-díj) egyik tanítványa, Charles Galton Darwin rámutatott (1914), a röntgendiffrakció Laue, Bragg és Ewald által adott geometriai értelmezése figyelmen kívül hagyta a kristályból kilépő reflexióknak a belső atomi rendre utaló intenzitását. E kérdésre keresve a választ Darwin elsőként dolgozta ki a röntgensugárzás szóródásának dinamikus elméletét.



2. ábra. Egykristályról készült röntgendiffrakciós felvétel.

A röntgensugárzás hullámhosszának mérhetősége lehetőséget adott Rutherford másik tanítványának, *Henry Gwyn-Jeffreys Moseley*-nek arra, hogy az elemek rendszámára vonatkozó elméletét igazolja. 1913 végén Manchesterben kimérte a kalcium és a cink közötti 11 elem karakterisztikus sugárzását, amelyből felállította a nevét viselő törvényt: „a *K*-vonalak hullámszámaának négyzetgyöke lineárisan változik az atomok rendszámával”.

A Krisztallográfia Nemzetközi Évének 2014-es deklarálása elsősorban az 1912–1914 közötti időszak újabb és újabb felfedezéseinek állít emléket. Nem feledkeznek meg azonban az emberi géniusz évszázadokon keresztül gyűjtött tudományos eredményeiről sem. Így *Paul Niggli* már 1919-ben kimondja, hogy a *homogén diszkontinuumnak* nevezett kristályrácsok szerkezetének leírásához nélkülözhetetlen a 230 tércsoport. A tércsoportok bonyolult összefüggéseit az *International Tables for Crystallography* I. kötetének 1935-től egyre bővülő kiadásából a gyakorló krisztallográfusok ma is tanulmányozzák.

A röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározások modelljei az első évtizedekben az ásványok kristályai. A krisztallográfiai fázisprobléma megoldásának nehézségei – a primitív felvételtechnikával súlyosbítva – a szerves kristályok vizsgálatát késleltették. Fellendülés csak a II. világháborút követő években indult meg. Az első kiemelkedő eredmény az *abszolút konfiguráció* meghatározása, amely igazolta *Emil Fischer* (1902. évi kémiai Nobel-díj) zseniális megsejtését. Ugyanis az *anomális diszperzió* gerjesztésével (*Johannes Martin Bijvoet* és munkatársai, 1949–1951) érvénytelenné válik a Friedel-törvény, amely szerint a röntgendiffrakciós kép a kristály eredeti szimmetriájától függetlenül centroszimmetrikus.

A két Bragg, apa és fia, 1915-ben kapták meg a Nobel-díjat, azóta közel 20 Nobel-díjat ítéltek oda krisztallográfiai munkáért.

A modern genetika, a gyógyszertervezés, az anyagtudomány stb. valahogy mind az egyszerűségében zseniális Bragg-egyenletből nőttek ki. Leghétköznapiabb alkalmazása ma is a polikristályok diffraktométeres vizsgálata. Ebben az elrendezésben a diffrakciós képnek csak egy független változója van, a Bragg-szög (2θ). Csábítónak, de egyben lehetetlennek tűnik az eltelt további 90 év újabb és újabb világraszóló eredményeit ismertetni. Az egyre nagyobb felbontású (negyedik generációs) szinkrotronok és a még biztatóbb, az alig öt éve elérhető szabadelektron-lézerek ma még elképzelhetetlen eredményekkel gazdagíthatják és fogják gazdagítani az emberiséget. Mindezek mögött azonban mindig is ott van a szorgalommal (szerénységgel) ötvözött emberi zsenialitás. Ennek illusztrálására szolgáljon egy nagy-szerű ember *Dame Dorothy Crowfoot Hodgkin* (kémiai Nobel-díj, 1964) kiemelése (3. ábra).

A Krisztallográfia Nemzetközi Éve nyitóünnepsége

A Krisztallográfia Nemzetközi Évét (<http://www.iucr2014.org>) 2014. január 20–21-én ünnepélyes keretek között nyitotta meg a Nemzetközi Krisztallográfiai Unió (IUCr) (4. ábra) és az Egyesült Nemzetek Szö-

3. ábra. Dorothy Crowfoot Hodgkin 50 évvel ezelőtt kapta a Nobel-díjat biokémiai anyagok (például B₁₂ vitamin, penicillin) szerkezetének meghatározásáért.



vetségének Nevelésügyi, Tudományos és Kulturális Szervezete az UNESCO párizsi főhadiszállásán a Place de Fontenoy-ban. Az UNESCO tevékenységének általános célja, hogy megteremtse a civilizációk, kultúrák és emberek közötti, a közös értékek iránti tiszteleten alapuló párbeszédhez szükséges körülményeket. Ehhez a programhoz illeszkedik, hogy a 2014-es évet, a Laue-kísérletért adományozott Nobel-díj, valamint W. H. Bragg és W. L. Bragg által az első kristályszerkezetek publikálásának centenáriumát a kristallográfiának dedikálták.

A résztvevőket videóüzenetben köszöntötte *Ban Ki-moon*, az ENSZ főtitkára. *Nicole Moreau*, a IUPAC volt elnöke a Kémia 2011-es Nemzetközi Éve szervezőbizottságának elnöke, beszédében megemlítette, hogy az átlagemberek többsége inkább tart a kémiától, de a kristályok világát csodálatosnak tartja. *John Dudley* az Európai Fizikai Társaság elnökeként beszámolt a 2015-ös rendezvény, a Fény Nemzetközi Évének előkészületeiről. Ünnepi beszédet mondott még *Soumaia Benkhaldoun*, a marokkói felsőoktatási és kutatási miniszterhelyettes, *Alain Fuchs*, a francia Nemzeti Tudományos Kutatási Centrum (CNRS) elnöke, *Walter Maresch*, a Nemzetközi Minerológiai Szövetség elnöke és *Gregory Petsko*, a Biokémia és Molekuláris Biológia Nemzetközi Uniójának elnöke.

Irina Bokova, az UNESCO főigazgatója megnyitó beszédéből a következő gondolatokat emeljük ki:

„Napjainkban a röntgendiffrakció az anyag atomi, illetve molekuláris szintű megismerésének vezető technikája. A kristallográfia hozzájárul az élet alapjainak megértéséhez, jelentősen formálta a 20. századot. Mára a kristallográfia a tudomány számos területének meghatározó módszere lett: a bányászat, mezőgazdaság, gyógyszeripar, számítástechnika, űrkutatás stb. számára elengedhetetlenül szükséges új anyagok kifejlesztéséhez. De még mindig vannak országok, ahol nincs megfelelő tapasztalat ezen a területen. Ezért fogott össze az IUCr és az UNESCO, hogy a kristallográfia az érdeklődés homlokterébe kerüljön, amely összefogáshoz minden országnak hozzá kell járulnia. A kristallográfia a fenntartható fejlődés motorja lehet, támogatja a nők szerepvállalását a tudományban, és serkenti az észak-dél együttműködést. A kristallográfia

mindenki számára elérhető, egyetemi, kutatóintézeti körülmények között is művelhető. Minden nemzet jelentős szociális és gazdasági előnyökre tehet szert viszonylagosan nem nagy beruházás árán.”

Claude Lecomte, az IUCr alelnöke a következőkről számolt be:

„Noha a kristallográfia magas szintű tudomány, alkalmazásának eredményeit mindenki élvezheti és elismeri. Az IUCr és az ENSZ széleskörű programokat szervez ebben az évben az iskolásoknak meghirdetett kristálynövesztési versenytől a kutatóknak és tudománypolitikusoknak szervezett csúcstalálkozóig.”

„A Kristallográfia Nemzetközi Éve globális kezdeményezés, amely eredményeképp az életminőség mindenki számára javulni fog” – foglalta össze *Guatam R. Desiraju*, az IUCr elnöke.

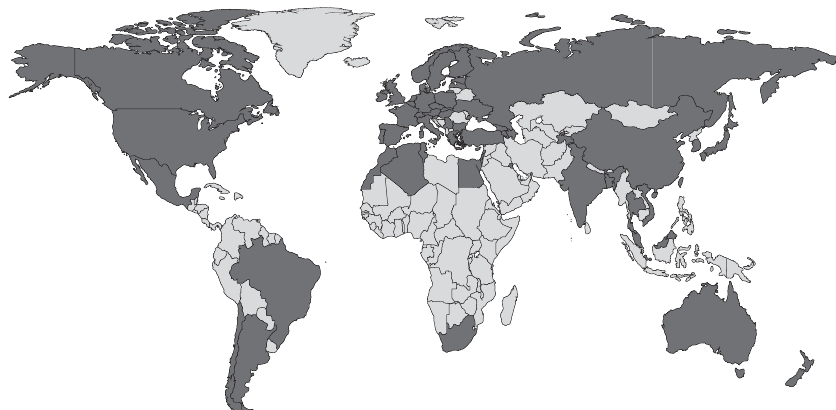
Az elsősorban Afrikában, Dél- és Közép-Amerikában, Dél-Ázsiában több, mint 20 országot érintő „nyitott laboratórium” program indul a kristallográfia terjesztése céljából a világ minden részében. Az első ilyen laboratóriumokat Argentínában, Elefántcsontparton, Marokkóban, Dél-Afrikában és Uruguay-ban nyitották meg. A kezdeményezést felkarolták a nagy műszergyártó cégek, a Bruker, a Panalytical, az Agilent, a STOE, a Dectris, a Xenocs valamint a CCDC.

Jenny Pickworth Glusker kristallográfia-történeti kirándulásra hívta a nyitóünnepség résztvevőit, de bemutatta a jelent és kitekintést adott a kristallográfia jövőjébe is. Érdekességgé említette a vikingek kristallográfiai ismereteit, akik a kalcit kettőtörését használták fel a navigálásban a Nap helyzetének meghatározására borús napokon; vagy *Robert Hooke*-ot, aki már 1665-ben arról elmélkedett, hogy a kristályformák szabályossága utal a belső tartalom szabályos elrendeződésére. Bemutatta az évek előrehaladásával az anyag belső szerkezetének megértéséhez vezető utat, valamint a matematikai és technológiai fejlődést, amely lehetővé tette a diffrakciós mintázatok, az atomok térbeli elrendeződésének értelmezését. Ma már a kristallográfusok számára egyre kisebb méretű egykristályok vizsgálata is lehetségessé válik, ugyanakkor olyan nagy molekulák, mint a vírusok szerkezetét is meg tudják határozni.

Tehetséges fiatal, de már nem pályakezdő kristallográfusokkal beszélgetett *Philip Ball*, aki a *Nature*

folyóirat szerkesztője volt 20 éven keresztül. Philip Ball bevezetőjében kiemelte a kristallográfia területén kimagasló eredményt elért kutatónőket: *Dorothy Crowfoot Hodgkin*, *Kathleen Lonsdale* és *Rosalind Franklin* munkásságát. Bemutattott egy fényképet, amely a Solvay-konferencián készült 1913-ban Brüsszelben, ahol együtt látható M. von Laue, W. L. Bragg, *Marie Curie* és *Albert Einstein*, különböző országokból meghívott tudósok között. E konferencia témáját kikerülhetetlenül határozták meg az új kristallográfiai ismeretek.

4. ábra. A Nemzetközi Kristallográfiai Unió tagországai.



A 2012. évi kémiai Nobel-díjat *Brian Kobilka Robert J. Lefkowitz-cal* megosztva kapta „a G-protein-kapcsolt receptorok felfedezéséért és működésük leírásáért”. Kobilka orvosként kezdte pályáját, de hamar rájött, hogy a krisztallográfia alapvetően szükséges kutatásaihoz. A megnyitó ünnepségen tartott előadásában leírta a G-protein-kapcsolt receptorokon, a sejtmembránon való jelátvitelért felelős anyagokon végzett kutatómunkáját. Ezek az anyagok részt vesznek a látásban, szaglásban és az ízlelésben, a ma használatos gyógyszerek közel fele ilyen típusú receptorokon hat. Szerkezetük ismeretében még specifikusabb gyógyszerek állíthatók elő, kevesebb mellékhatással. Az inaktív és aktív állapotú szerkezetek megoldásáig számos akadályt kellett leküzdeni, elegendő fehérjét kellett előállítani, tisztítani, oldani, kristályosítani. A különböző – kollaboráló vagy gyakran rivális – kutatócsoportokban felhalmozódó ismereteknek és az Európai Szinkrotron Sugárforrásnál lévő mikrofókuszos mérőállomásnak köszönhető, hogy a szerkezetmegoldás lehetővé vált.

Kerekasztal-beszélgetés keretében nyerhettünk bepillantást a „BRICS országok” (Brazília, Oroszország, India, Kína és Dél-Afrika) krisztallográfiai teljesítményébe. Példaképpnek állították ezeket az államokat, mint jelentős teljesítményt mutató, gyorsan fejlődő hatalmakat a krisztallográfiában. A képviselők – nagykövetek, tudománypolitikusok és krisztallográfusok – meg vannak győződve a tudományos kutatás és a gazdasági növekedés szoros kapcsolatáról, és ennek megfelelően növelték az országok beruházásait a tudományba. Az első brazil szinkrotron 1997-ben épült, a második 2016-ra készül el. India és Dél-Afrika erős a szupramolekuláris kémiában és a kristályépítészetben. Oroszország a 19. századig visszanyúló hagyományokra támaszkodhat. Kínában is sorra nyitják a műszeres centrumokat, és jelentős eredményeik vannak a fémorganikus vázszerkezetű anyagok (MOF), nem-lineáris optikai anyagok, molekuláris nanomágnesek, fehérjék vagy a SARS vírus szerkezetének meghatározása területén.

Külön szekció foglalkozott a krisztallográfia társadalmi szerepével és jövőbeli lehetőségeivel. *John Spence* foglalta össze a röntgenkrisztallográfia történetét Röntgen korai munkáitól a szinkrotronforrásokon keresztül a legújabb fejlesztésű röntgen szabadelektron-lézerekig (XFEL). Az első XFEL berendezés 2009-ben kezdett működni Stanfordban, 10^{12} fotont szolgáltatva pulzusonként, 1,9 Å-ös felbontást elérve. Az XFEL új módszerek kifejlesztését teszi lehetővé a fehérje-krisztallográfiában. A kristály „diffraktál, majd szétrobban” elven alapuló mérések paradox módon nyújtanak megoldást a sugár okozta károsodás problémájára: nagyon rövid, femtoszekundumos, de nagy intenzitású röntgenimpulzust alkalmaz. Ez a módszer lehetővé teszi, hogy egyedi molekuláról, például vírusról kapjunk szórási képet. Szobahőmérsékleten végezhetjük a mérést az eredeti kristálykörnyezetben a minta lefagyasztása nélkül, vagy molekuláris mozt készíthetünk időben lejátszódó folyamatokról, mint például a fotoszintézis.

Martijn Fransen magához ragadta a figyelmet a mexikói Naica-barlang hatalmas kristályainak bemutatásával, majd visszahozta a hallgatóságot a laboratóriumi méretekhez, bemutatva a röntgendiffrakció (leginkább pordiffrakció) gyakorlati jelentőségét a cementiparban, ércek analizisében, gyógyszeriparban, mikroelektronikában, repüléstechnikában stb. *Juliette Pradon* előadást tartott a krisztallográfiai kutatásról a fejlődő világban. Beszámolt a Cambridge-i Krisztallográfiai Adatközpont és a Kinshasai Egyetem közötti együttműködésről. A polgárháború súlytotta Népi Demokratikus Kongóban az egyetemen stabil körülmények között dolgoznak az együttműködésben kapott Cambridge-i Szerkezeti Adatbázissal és más kémiai számítástechnikai eszközökkel a Cambridge-ben kiképzett majd hazatért szakemberek és tanítványaik. *David Bish* és *David Blake* nagyon érdekes előadást tartott a krisztallográfia szerepéről az Univerzum kutatásában, bemutatva az első röntgendiffrakciós felvételeket, amelyek egy másik bolygón készültek. 20 év alatt fejlesztették ki a miniatűrízált, cipősdoboz méretű XRD és XRF készüléket, amelyet a Curiosity-űrhajó vitt a Mars felszínére, és amely az első röntgendiffraktogramokat 2012 októberében küldte a Földre. Egy homokdűnéből származó minta analízise amorf tartalmat mutatott, hasonlót a hawaii Mauna Kea vulkán bazaltos talajához. A második minta az Éleshegy egy furatából származott és agyagásványokat, hidratált ásványokat mutatott ki. Ez bizonyítja, hogy korábban víznek kellett lennie a Mars bolygón.

Több előadás foglalkozott a krisztallográfia, a szimmetria és művészetek kapcsolatával. *Philippe Walter* szólt a röntgendiffrakció alkalmazásáról a műtárgyak vizsgálatában. A cél, hogy nagyon apró mintamennyiség felhasználásával nyerjenek információt például szinkrotronnál, vagy hogy szállítható röntgen-diffraktométert lehessen vinni a vizsgálat helyszínére a Mars-expedícióhoz hasonlóan. A módszer alkalmazásának alapja, hogy a legtöbb pigment kristályos. A krisztallitok összetétele és alakja vizsgálható diffrakcióval. Megtudható, hogy (1) milyen pigmenteket alkalmaztak egy adott helyen egy adott periódusban, (2) a pigmentek származása a szennyezőkből, így feltérképezhetők a kereskedelmi útvonalak, (3) feltárhatók a festék fizikai tulajdonságai, (4) követhetők a festékben az idővel bekövetkező változások. Az iszlám ornamentikus művészetek szimmetriájába *Abdelmalek Thalal* és *Emil Makovicky* vezette be a hallgatóságot. A periodikus csempézetek a síkszimmetriákkal leírhatók, amelyek összefoglalása a Nemzetközi Táblázatokban megtalálható. De kvázi-periodikus iszlám csempeminták is készültek már a középkorban ötös és tízes szimmetriával. *Peter J. Lu*, a Harvard Egyetemről, a középkori iszlám építészetben található modern matematika mélységeit tárta fel.

Maciej Nalecz, az UNESCO Alap és Mérnöki Tudományok Osztálya igazgatójának zárszavával fejeződött be a Krisztallográfia Nemzetközi Évének megnyitó ünnepsége, amelyen a krisztallográfusok nagy családjából több mint 800-an vettek részt.