



United Nations  
Educational, Scientific and  
Cultural Organization



International  
Union of  
Crystallography

Partners for the International Year of Crystallography 2014



Kálmán Alajos–Bombicz Petra

■ MTA Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

# 2014 – a Kristallográfia Nemzetközi Éve

Az utóbbi évek gyakorlatát<sup>1</sup> folytatva, az ENSZ a 2014-es évet a *Kristallográfia Nemzetközi Évének* nyilvánította. A Nemzetközi Kristallográfiai Unió (International Union of Crystallography, IUCr) – együttműködve az UNESCO-val – többek között nemzeti és nemzetközi rendezvényekkel, konferenciákkal, az alkalomhoz illő kiadványokkal emlékezik meg azokról a tudomány történetében fordulópontot jelentő felfedezésekről, amelyek 1912 áprilisában kezdődtek, és az elkövetkező pár évben (1912–1920) megváltoztatták az anyagi világunkról alkotott tudásunkat. A szilárd kristályokat felépítő atomok (kisebb és nagyobb molekulák) létezése elvont fikcióból mérhető, számokban kifejezhető egzakt ismeretté vált.

A röntgenkristallográfia 1912-beli születése a centenáriumi ünnepek központi eseménye, és egyben az évszázadokra visszanyúló, a kristályokkal kapcsolatos, szorgalmas munkákkal összegyűjtött ismeretek felelevenítése, seregszemléje.

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* (mineralia) nevezett, alakjukat megőrző szilárd anyagokat. A gyarapodó 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, szögmérőkkel, majd optikai goniométerekkel 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 (Ī) kombinálása a gírekkel (2, 3, 4, 6) három újabb szimmetriaműveletet 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 pontcsoporthoz) jutunk, amit Johann Hessel írt le először (1830). Ez egyben a kristályok vizuális leírásának, karakterizálásának határát jelentette. Ezt tekintjük a klasszikus kristálygeometriának.

A morfológiai vizsgálatok természetesen folytatódtak. René Just Haüy a kalcit ( $\text{CaCO}_3$ ) kitűnő romboéderez hasadásának ta-

nulmányozása vezette (1784) egy újabb mérőföldkövet 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 *molécules intégrantes* fizikai, illetve kémiai jellemzőktől független geometriai elemek. 1848-ban Auguste Bravais a 32 kristályosztály ismételt levezetése mellett 14 térrácsot javasolt. A spekulatív (azaz vizuálisan nem igazolható) rácselmélet alapja a translációval létrehozott végtelen pontsor. A pontsor ortogonális vagy nem ortogonális (oblique) translációjával történő megsokszorozása adja a síkrácsot. A síkrácsok azonos távolsággal történő egymásra helyezése adja a térrácsot, melynek 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, ún. *centrál*t rács pedig úgy jön létre, hogy a primitív cellák (pl. triklin vagy monoklin) társításával (2 vagy 4 cellát felhasználva) a megnövelt térfogatban további szimmetriaműveletek értelmezhetők.

Bravais *transzláció*ra épülő térrácsa a tércsoport-elmélet előfutára. Leonhard Sohncke 1879-ben két új szimmetriaelemet ismert fel: a csavartengelyt és a csúszósíkot. Ezt követően az orosz E. S. Fedorov elsőként vezeti le (1885) a 230 tércsoportot. Fedorovtól függetlenül ugyanerre az eredményre jut Arthur Schönflies német matematikus (1891), majd harmadikként az angol William Barlow, aki modellkísérletek alapján közli (1883) öt köbös rendszerű kristály, köztük a kőső szerkezetét. Sohncke ezek helyességét megkérdőjelezi. Barlow válaszként ugyancsak levezeti 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 lapszög-mérésekből felismerte, hogy a kalcit, a magnezit és a sziderit (Ca, Mg,  $\text{FeCO}_3$ ) kissé eltérő méretű síkokkal határolva romboéderez kristályok alakjában kristályosodnak. 1819-ben Mitscherlich megállapította, hogy bizonyos sópárok, mint a  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$ ,  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$  és  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{AsO}_4$ , hasonló ké-

<sup>1</sup> 2009 a Csillagászat, 2010 a Földbolygó, míg 2011 a Kémia Nemzetközi Éve volt.





miai összetétel mellett azonos kristályformákban növekszenek. A különbség egy atom cseréje egy másikkal. Ezeket a párokat *izomorfoknak* nevezte el. E felismerés haszna a kémiában jelentkezett, Berzelius (Mitscherlich tanára) a szelén atomsúlyát a  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{Ag}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{SeO}_4$  és  $\text{Ag}_2\text{SeO}_4$  izomorfiaja alapján határozta meg. Ugyancsak Mitscherlich ismeri fel (1821), hogy a kalcit és az aragonit azonos kémiai összetétel ( $\text{CaCO}_3$ ) mellett kristályformájában (romboéderez, illetve rombos) és fizikai tulajdonságaiban különböző. A polimorfianak elnevezett jelenség a 20. század hatvanas éveitől folyamatosan az ipar (festék, gyógyszer és robbanószer) érdeklődésének középpontjában áll.

Az 1870-es évektől Paul von Groth fejlesztette tovább az izomorfia kritériumára vonatkozó ismereteket, s többek között megállapította, hogy a szerves kristályok izomorfiaja különbözik Mitscherlich szerves sóinak izomorfiajától. 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 molekulaszámát elosztotta a mért sűrűséggel, majd a tengelykereszteket ezzel a molekula-térfogattal ( $V^*$ ) normálta. Erre alapozva kísérlete meg atomokkal (Cl, Br, I), illetve atomcsoportokkal ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5$ ,  $\text{NO}_2$  stb.) történő hidrogén-szubsztitúciónak kémiailag rokon kristályokra való morfológiai hatását leírni. Az észlelt alakváltozást morfotrópiának nevezte. Mivel Groth becslései a kristályosztályok és a tengelyarányok ismeretére korlátozódtak, módszerének alapvető korlátja a molekula-térfogat alkalmazása. Csak a röntgenkristallográfia deríthette ki, hogy a tényleges elemicella-térfogatok ( $V$ )  $1,66 \cdot Z$ -vel nagyobbak Groth  $V^*$  értékeinél, azaz a kristály tércsoportjától függetlenül 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 Ewaldnak a fény optikai kettőtörésének számításaihoz Groth a modellként választott anhidrit ( $\text{CaSO}_4$ ) rácsát primitívnek adta meg. Szerencsére, ugyanezen időben Ewald és Max Laue találkozására (München) és konzultációja 1912 áprilisában elvezetett az utóbbi nevével világhírt nyert kísérlethez.

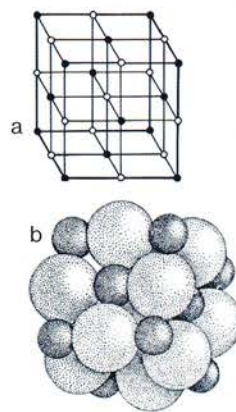
Ehhez azonban a röntgensugárzás felfedezése (1895) is kellett, melynek valós természetéről, bár a kérdéssel foglalkozók közül többen is kaptak Nobel-díjat (Wilhelm Conrad Röntgen, Charles Glover Barkla, Wilhelm Wien), 1912-ig csak ellentmondó sejtések voltak. A történelmi jelentőségű Laue-kísérlet azután egyszerre igazolta az X-sugárzás hullámtermészetét, interferenciája pedig a kristályok rácsszerkezetét. Ebből kiindulva William Henry és William Lawrence Bragg (apa és fia), a Barlow–Pope-féle modellek segítségével már 1912 végéig értelmezte az első kristályokról ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{KCl}$  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 háromdimenziós rács  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$  translációjának megfelelően három egyenlettel írta le, amelyek jobb oldala rendre a sugárzás hullámhossza,  $\lambda$ , illetve annak felharmónikusai,  $m\lambda$ ,  $p\lambda$  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 reciprok térben történő rendkívül szemléletes leírásával. Ezen a 22 éves William Lawrence Bragg segített. A Cambridge Philosophical Society 1912. november 11-én tartott ülésén Bragg *The Dif-*

*fraction of Short Electromagnetic Waves by Crystals* című dolgozatát J. J. Thomson mutatta be. Bragg briliáns matematikai felkészültséggel talált rá Laue tévedéseire, többek között arra, hogy a köbös  $\text{ZnS}$  szerkezetének felállításában hol és miben tévedett. A diffrakció jelenségét leegyszerűsítő és ebben zseniális problémakezelése az, hogy a síkokba rendezett atomokat egymástól azonos távolságú ( $d$ ), párhuzamos tükörnek tekintette. Ezekről az adott beesési szögek ( $\alpha$ ) mellett tükröződő nyalábok akkor erősítik egymást maximálisan, ha az útkülönbségük a hullámhossz egész számú többszöröse, matematikailag megfogalmazva  $n\lambda = 2d\cos\alpha$ . W. L. Bragg hamarosan a máig használt „Bragg-egyenletben”, praktikus okból, a beesési szöveget pótiszögével ( $\theta$ ) helyettesítette, így  $n\lambda = 2d\sin\theta$ , ahol  $d$  a rácsállandó. Ebből a felírásból válik láthatóvá a diffrakciós kép arkhimédészi fix pontja: a diffraktált sugár ( $s$ ) mindig  $2\theta$  szöveget zár be a primer ( $s_0$ ) sugárral. W. L. Bragg felismerte, hogy szépen fejlett kristálylapon tükrözőtt röntgensugárzás eltérítésének szögét ( $2\theta$ ) megfelelő detektorral (ionizációs kamra) mérve, továbbá a tükrözésre használt kristálylap rácsállandóját ( $d$ ) ismerve, a röntgensugár hullámhossza meghatározható. Bragg már tudta, hogy a kősó köbös, lapon centrált rácsában négy mól  $\text{NaCl}$  ( $Z = 4$ ) alkotja az elemi cellát, így annak térfogata a sűrűség ( $\rho$ ) ismeretében kiszámítható.

$$V = 1,66 M Z/\rho,$$

ahol  $M$  a  $\text{NaCl}$  mólsúlya, 1,66 pedig az Avogadro-féle számnak ( $6,0228 \cdot 10^{23}$ ) a dimenzió rendezése utáni maradéka. A kocka élhossza a térfogat köbgyöke, s ennek fele az analízator kristályának  $d$  értéke (**1. ábra**). Történelmi jelentősége, hogy ez az első kísérleti úton meghatározott ( $\text{Na-Cl}$ ) 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 kősó higroszkópos, hamarosan áttértek a tiszta, jól kristályosodó kalcitra, melynek romboéderez hajlásszögét ( $46^\circ 7'$ ) optikai goniméterrel kellő pontossággal kimérhették.

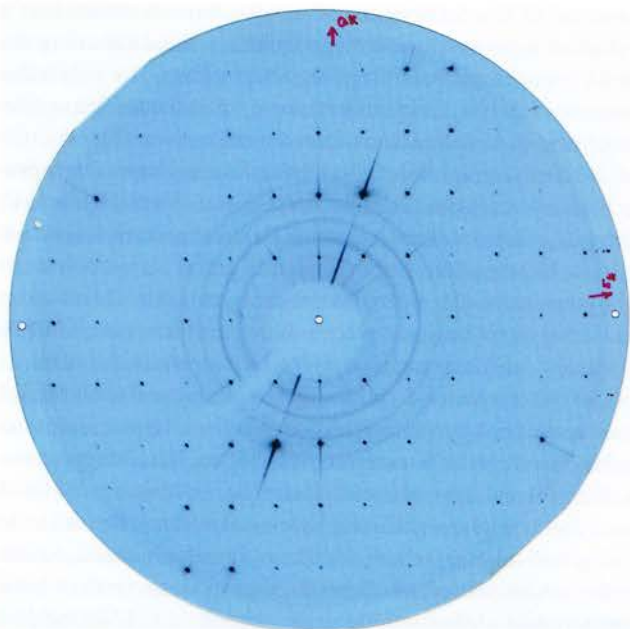


1. ábra. A kősó szerkezete

Ha az  $1/\lambda$  modulusú primer ( $s_0$ ) és diffraktált sugár ( $s$ ) által bezárt  $2\theta$  szög alkotta egyenlő szárú háromszögből az *átfogót*,  $S = (2/\lambda)\sin\theta$ , míg a Bragg-egyenletből a rácsállandót  $1/d = (2/\lambda)\sin\theta$  kifejtjük, kitűnik, hogy a  $\theta$ -val 0 és  $2s_0$  között változó  $S$  vektor reciproka a rácsállandónak. Az általa alkotott vektorteret Ewald után reciprok térnek nevezzük (**2. ábra**). Amint arra azonban Ernest Rutherford (kémiai Nobel-díj, 1908) 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. Keresve e kérdésre a választ Darwin elsőként dolgozta ki a röntgensugárzás szóródásának dinamikus elméletét.

A röntgensugárzás hullámhosszának mérhetősége lehetőset ad Rutherford másik tanítványának, Henry Gwyn-Jeffreys Moseley-nek arra, hogy az elemek rendszámára vonatkozó elméletét igazolja. 1913 végén Manchesterben kiméri a kalcium és a cink közötti II elem karakterisztikus sugárzását, melyből felállítja a nevével viselő törvényt: „a K-vonalak hullámszámának négyzetgyöke lineárisan változik az atomok rendszámával”.





2. ábra. Egykristályról készült röntgendiffrakciós felvétel

Az, hogy 2014-et nyilvánították a Kristallográfia Nemzetközi Évének, elsősorban az 1912 és 1914 közötti idő újabb és újabb felfedezéseinek állít emléket. Nem feledkezik meg azonban az emberi génusz 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 kiadásai a gyakorlati kristallográfusok ma is bibliaként tanulmányozzák.

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

A két Bragg, apa és fia, 1915-ben kapták meg a Nobel-díjat, s azóta közel 20 Nobel-díjat ítéltek oda kristallográfiai munkáért. A modern genetika, a gyógyszertervezés, az anyagtudomány, és sorolhatnánk, valahogy mind az egyszerűsítésével zseniális Bragg-egyenletből nőttek ki. Leghétköznapibb alkalmazása ma is a polikristályok diffraktométeres vizs-



3. ábra. Dorothy Crowfoot Hodgkin 50 évvel ezelőtt kapta a Nobel-díjat biokémiai anyagok (B<sub>12</sub>-vitamin, penicillin) szerkezetének meghatározásáért

gálata. Ebben az elrendezésben a diffrakciós képnek csak egy független változója van, a Bragg-szög ( $2\theta$ ). 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, alig öt éve elérhető szabadelektron-lézerek eredményei ma még elképzelhetetlen eredményekkel gazdagíthatják és fogják gazdagítani az emberiséget. Mindezek mögött azonban mindig is ott van a szorgalommal (szerénységgel) ötvözött emberi zsenialitás. Ennek bizonyítására szolgáljon egy nagyszerű ember, Dame Dorothy Crowfoot Hodgkin (kémiai Nobel-díj, 1964) kiemelése (3. ábra).

A Kristallográfia Nemzetközi Évét (<http://www.iycr2014.org/>) 2014. január 20–21-én ünnepélyes keretek között nyitotta meg a Nemzetközi Kristallográfiai Unió (IUCr) (4. ábra) és az Egyesült Nemzetek Szövetségének Nevelésügyi, Tudományos és Kulturális Szervezete az UNESCO párizsi főhadiszállásán, a Place de Fontenoy-n. Az UNESCO tevékenységének általános célja, hogy megteremtse a civilizációk, kultúrák és emberek közötti, a közös



4. ábra. A Nemzetközi Kristallográfiai Unió tagországai

értékek iránti tiszteleten alapuló párbeszédhez szükséges körülményeket. Ebbe a programba illeszkedik bele, hogy a 2014-es évet, a Laue-kísérletért adományozott Nobel-díj, valamint W. H. és W. L. Bragg által az első kristályszerkezetek publikálásának centenáriumát, a kristallográfiának dedikálták.

A résztvevőket videoüzenetben köszöntötte Ban Ki-moon, az ENSZ főtitkára. Nicole Moreau, az 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 rendezvényre, a Fény Nemzetközi Évére való készüléstről. Ünnepi beszédet mondott még Soumaia Benkhaldoun marokkói felsőoktatási és kutatási miniszterhelyettes, ugyanis a marokkói kristallográfusok vezették az ENSZ-nél a projektet, Alain Fuchs, a francia Nemzeti Tudományos Kutatási Központ (CNRS) elnöke, Walter Maresch, a Nemzetközi Minerológiai Szövetség elnöke és Gregory Petsko, a Biokémia és Molekuláris Biológia Nemzetközi Uniójának elnöke.

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 és a technika számos területének – bányászat, mezőgazdaság, gyógyszeripar, számítástechnika, űrkutatás stb. – meghatározó mód-





szere lett, és 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 krisztallográfia az érdeklődés homlokterébe kerüljön, amelyhez minden országnak hozzá kell járulnia. A krisztallográfia a fenntartható fejlődés motorja lehet, támogatja a nők szerepvállalását a tudományban és serkenti az észak-dél együttműködést. A krisztallográfia mindenki számára elérhető, egyetemi, kutatóintézeti körülmények között is művelhető. Minden nemzet jelentős szociális és gazdasági előnyökre tehet szert viszonylagosan nem nagy beruházás árán. Ezeket a gondolatokat mondta el Irina Bokova, az UNESCO főigazgatója megnyitó beszédében.

Míg a krisztallográfia magas szintű tudomány, addig alkalmazásának eredményeit mindenki élvezi és elismeri. Az IUCr és az ENSZ széles körű programokat szervez ebben az évben az iskolásoknak meghirdetett kristálynövesztési versenytől a kutatóknak és tudománypolitikusoknak szervezett csúcstalálkozóig. A Krisztallográfia Nemzetközi Éve globális kezdeményezés, mely eredményeképp az életminőség mindenki számára javulni fog, foglalta össze Guatam R. Desiraju, az IUCr elnöke. Elsősorban Afrikában, Dél- és Közép-Amerikában, Dél-Ázsiában több mint 20 országot érintő „nyitott laboratórium” program indul a krisztallográfia terjesztése céljából a világ minden részébe. Az első ilyen laborokat Argentínában, Elefántcsontparton, Marokkóban, Dél-Afrikában és Uruguayban nyitották meg. A kezdeményezést felkarolták a nagy műszergyártó cégek, a Bruker, a Panalytical, az Agilent, az STOE, a Dectris, a Xenocs, valamint a CCDc. Eről Claude Lecomte, az IUCr alelnöke számolt be.

Jenny Pickworth Glusker krisztallográfiatörténeti kirándulásra hívta a nyitóünnepség résztvevőit, de bemutatta a jelent és kitekintést adott a krisztallográfia jövőjébe is. Érdekességként említette például a vikingek krisztallográfiái ismereteit, akik a kalcit kettőtörését használták fel a navigálásban a Nap helyzetének meghatározására borús napokon és Robert Hooke-ot, aki már 1665-ben arról elmélkedett, hogy a kristályformák szabályossága utal a belső tartalom szabályos elrendeződésére. Előadásában támaszkodott könyvére (Glusker, J. P., Lewis, M., Rossi, M.: Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists. VCH Publisher, New York–Weinheim–Cambridge, 1984), mely a mai napig a krisztallográfiával ismerkedők fontos forrása. Bemutatta, milyen út vezetett az évek előrehaladásával az anyag belső szerkezetének megértéséhez, és azt a matematikai és technológiai fejlődést, mely lehetővé tette a diffrakciós mintázatok, az atomok térbeli elrendeződésének értelmezését. Ma már a krisztallográfusok számára egyre kisebb méretű egykristályok vizsgálata is lehetségesé válik, ugyanakkor olyan nagy molekulák, mint a vírusok szerkezetét is meg tudják határozni.

Tehetséges fiatal, de már nem pályakezdő krisztallográfusokkal beszélgetett Philip Ball, aki a Nature folyóirat szerkesztője volt 20 éven keresztül. Philip Ball bevezetőjében kiemelte a krisztallográfia területén kimagasló eredményt elért kutatóknak: Dorothy Crowfoot Hodgkin, Kathleen Lonsdale és Rosalind Franklin munkásságát. Bemutatott egy fényképet, amely a Solvay-konferencián készült 1913-ban Brüsszelben, melynek témáját megkerülhetetlenül meghatározták az új krisztallográfiái ismeretek; itt együtt látható M. von Laue, W. L. Bragg, Marie Curie és Albert Einstein – tudósok különböző országokból, a készülődő I. világháború árnyékában. Az azóta újjáépült konszenzus bizonyítékaként a világ minden részéről érkezett mai fiatal kutatók beszámoltak a munkájuk során tapasztalt sikerekről és nehézségekről. Európát Len-

gyelországból Marcin Nowotny képviselte. Szó volt többek közt a rövid időre szóló pénzügyi támogatásokról, a fiatal kutatókra nehezítő jelentős nyomásról: az egyidejű oktatás és publikálás kényszeréről, több országban jelentkező forráshiányról, megfelelő kooperációk kialakításának kihívásairól.

A 2012. évi kémiai Nobel-díjat Brian Kobilka kapta „A G-protein kapcsolt receptorok felfedezéséért és működésük leírásáért”, Robert J. Lefkowitzal megosztva. 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, a 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 ESRF-nél lévő mikrofókusz sugárútnak köszönhető, hogy a szerkezetmegoldás lehetővé vált.

Kerekasztal-beszélgetés keretében nyerhettünk bepillantást a „BRICS-országok” (Brazília, Oroszország, India, Kína és Dél-Afrika) krisztallográfiái 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 az országok növelték is a tudományra fordított összegeket. 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 az műszeres centrumokat, és jelentős eredményeik vannak a MOF, a nemlineáris optikai anyagok, a molekuláris nanomágnesek, a fehérjék és a SARS vírus szerkezetmeghatározásának területén. Megemlítendő, hogy a megnyitó ünnepségnek a Nemzetközi Krisztallográfiái Unió és a gyártók által viselt költségeihez jelentősen hozzájárult India, Dél-Afrika és Brazília, az ENSZ azonban nem.

Külön szekció foglalkozott a krisztallográfia szerepével a társadalomban és a jövőben. John Spence foglalta össze a röntgenkrisztallográfia történetét Röntgen korai munkáitól a szinkrotronforrásokon keresztül a legújabb fejlesztésű röntgen szabadelektron-lézerekig. Az első XFEL berendezés 2009-ben kezdett működni Stanfordban,  $10^{12}$  fotont szolgáltatva pulzusonként, 1,9 Å-ös felbontást elérve. Az XFEL új módszer a fehérjekrisztallográfiában, a kristály „diffraktál, majd elbomlik”, paradox módon nyújt megoldást a sugár okozta károsodás problémájára, nagyon rövid, femtoszekundumos, de nagy intenzitású röntgenpulzust alkalmazva. Ez a módszer lehetővé teszi, hogy egyedi molekuláról, például vírusról kapjunk szórás képét. Szobahőmérsékleten végezhetjük a mérést az eredeti kristálykörnyezetben a minta lefagyasztása nélkül, vagy molekuláris mozt készíthetünk időben lejártszó folyamatokról, például a fotoszintézisről.

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 analízisében, gyógyszeriparban, mikro-





## PÁLYÁZATI KIÍRÁS

## „Kémia Oktatásért” díjra

A Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Nyrt. 1999-ben díjat alapított általános, közép- és szakközépiskolai tanárok részére, hogy támogassa és erősítse a kémia színvonalas iskolai oktatását. A rangos elismerést, a személyenként 400 ezer forintos díjat kuratórium ítéli oda.

„A Richter Gedeon Alapítvány a Magyar Kémia Oktatásért” kuratóriuma a díjazottakat azok közül a jelöltek közül választja ki, akik több éve elismerten a legtöbbet teszik a kémia iránti érdeklődés felkeltésére, a kémia megszerettetésére, továbbá akiknek tanítványai az utóbbi években sikeresen szerepeltek a hazai és a nemzetközi kémiai jellegű tanulmányi versenyeken. A „Kémia Oktatásért” díjat 1999 óta eddig összesen 64 tanár nyerte el ([www.richter.hu/HU/Pages/kemiaoktatasa-lapivany.aspx](http://www.richter.hu/HU/Pages/kemiaoktatasa-lapivany.aspx)).

Az Alapítvány a díjat a 2014. évre is kiírja. Kérjük, hogy a kuratórium munkájának elősegítésére tegyenek írásos javaslatokat a díjazandó tanárok személyére. A rövid, legfeljebb egyoldalas írásos ajánlás tényszerű adatokat tartalmazzon a javasolt személy munkásságára vonatkozóan. A díj elsősorban a magyarországi kémiatanárok elismerését célozza, de a határon túli iskolákban, magyar nyelven tanító kémiatanárok is javasolhatók (ebben az esetben egy magyarországi és még egy helyi ajánlás is szükséges). Jelölést az iskolák igazgatóin, tanári munkaközösségein, kollégákon kívül egykori és jelenlegi diákok is adhatnak. Az írásos ajánlásokat legkésőbb **2014. szeptember 10-ig** kell eljuttatni az Alapítvány címére (Richter Gedeon Alapítvány a Magyar Kémia Oktatásért, 1475 Budapest, Pf. 27.). A díjak ünnepélyes átadására 2014 őszén, később megjelölendő időpontban kerül sor.

**Richter Gedeon Alapítvány  
a Magyar Kémia Oktatásért**

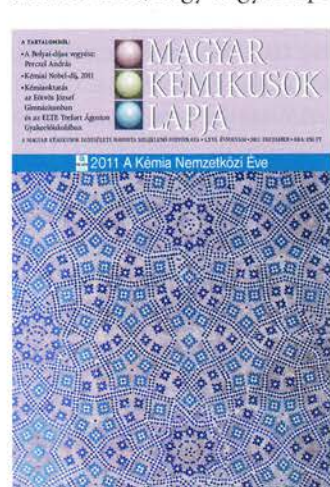
tainak főszerkesztője beszámolt az újonnan életre hívott, nyílt elérésű, magas impaktfaktor-tartományt megcélzó szerkezeti kémiai folyóirat, az IUCrJ sikeres indulásáról. Chris Llewellyn Smith előadása következett, aki a SESAME (Synchrotron-light for Experimental Science and Application in the Middle East) Tanácsának elnöke. A Jordániában, a Közel-Keleten épülő első szinkrotron 2,5 GeV-os harmadik generációs forrás lesz. A projekt résztvevői: Bahrein, Ciprus, Egyiptom, Irán, Izrael, Jordánia, Pakisztán, a Palesztin Önkormányzat és Törökország. A SESAME megépítésének célja a magas szintű tudományos eredmények elérésén túl, hogy elősegítse a részt vevő – korábban néha háborúban álló – országok közötti együttműködést a tudományos fejlődésben, párbeszéd és megértés kialakulását a különböző kulturális, politikai és vallási háttérrel rendelkező kutatók között, ezáltal elősegítse a részt vevő országok külső és egymás közötti jobb politikai megbecsülését és méltánylását. A SESAME a kutatók kezdeményezésére jött létre az UNESCO támogatásával. 2015–2016 fordulóján helyezik üzembe.

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

elektronikában, repüléstechnikában stb. Juliette Pradon a fejlődő világban folyó krisztallográfiai kutatásról tartott előadást. Beszámolt a Cambridge-i Krisztallográfiai Adatközpont és a Kinshasai Egyetem közötti együttműködésről. A polgárháború sújtotta 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 és hazatért szakemberek és tanítványaik. David Bish és David Blake nagyon érdekes előadást tartott arról, hogy a krisztallográfia milyen szerepet tölt be az univerzum kutatásában, bemutatva az első röntgendiffrakciós felvételeket, melyek egy másik bolygón készültek. 20 éve alatt fejlesztették ki a miniatűrízalt, cipősdoboz méretű XRD és XRF készüléket, melyet 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, hasonló a hawaii Mauna Kea vulkán bazaltos talajához. A második minta az Éles-hegy egy furatából származott, és agyagásványokat, hidratált ásványokat mutatott ki. Ez bizonyítja, hogy korábban kellett lennie víznek a Mars bolygón.

Frank Burgázy, a Bruker AXS elnöke összefoglalót adott a krisztallográfiai technológia elmúlt 100 éves fejlődéséről. Bemutatta a források, az optikák, a detektorok és a szoftverek területén bekövetkezett fejlődést. Elmesélte, hogyan próbált Röntgen röntgencsőhöz jutni: azzal akarta meggyőzni a gyártó Siemenset (amely már három hónappal a felfedezés után kereskedelmi forgalomba hozta a röntgencsövet), hogy ha csökkenti az árat, többet tud eladni belőle... – a terv azonban nem vált be.

Több előadás foglalkozott a krisztallográfia, a szimmetria és a művészetek kapcsolatával. Philippe Walter arról beszélt, hogyan alkalmazzák a röntgendiffrakciót a műtárgyak vizsgálatában. Az a cél, hogy nagyon apró mintamennyiség felhasználásával nyerjenek információt, például szinkrotronnál, vagy hogy szállítható röntgendiffraktóméter vigyenek a vizsgálat helyszínére, a Mars-expedícióhoz hasonlóan. A módszer alkalmazásának alapja, hogy a legtöbb pigment kristályos. A krisztallitok összetétele és alakja vizsgálható diffrakcióval: 1. meg tudható, hogy milyen pigmenteket alkalmaztak egy adott helyen egy adott periódusban; 2. megismerhető a pigmentek származása a szennyezőkből, így feltérképezhetők a kereskedelmi útvonalak; 3. a festék fizikai tulajdonságai feltárhatók, 4. a festékben követhető az idővel bekövetkező változások. Az iszlám ornamentikus művészetek szimmetriájába Abdelmalek Thalal és Emil Makovicky vezette be a hallgatóságot. A periodikus csempézetek a síkszimmetriákkal leírhatók, melyek összefoglalása a Nemzetközi Táblázatokban megtalálható. De kváziperiodikus iszlám csempeminták is készültek már a középkorban ötös és tízes szimmetriával (5. ábra).



**5. ábra. Ötös, tízes szimmetria Abdullah kán buharai medreszén (Peter J. Lu szívességéből, egy korábbi MKL-címlapon)**

szimmetriájába Abdelmalek Thalal és Emil Makovicky vezette be a hallgatóságot. A periodikus csempézetek a síkszimmetriákkal leírhatók, melyek összefoglalása a Nemzetközi Táblázatokban megtalálható. De kváziperiodikus iszlám csempeminták is készültek már a középkorban ötös és tízes szimmetriával (5. ábra). Peter J. Lu, a Harvard Egyetemről, a középkori iszlám építészetben található modern matematika mélységeit tárta fel.

Samar Hasnain, a Nemzetközi Krisztallográfiai Unió folyóira-