

**Botlik Bence Béla – Gyűrűs Boldizsár – Herczeg Donát**

## **Kvázikristályok és közelítő szerkezeteik**

### **Kristálytani összefoglaló<sup>1</sup>**

Kristályokkal a krisztallográfia, vagy más néven a kristálytan tudományága foglalkozik. A hagyományos definíció szerint kristálynak azokat a szilárd halmazállapotú anyagokat nevezzük, amelyek belső szerkezete rendezett, bennük a különböző entitások (atomok, molekulák, ionok) periodikusan helyezkednek el. A háromdimenziós kristályrács felépíthető a legkisebb ismétlődő egység, az elemi cella három térirányba való eltolásával. Ez az eltolási (transzlációs) szimmetria egyértelmű jele a periodicitás meglétének.

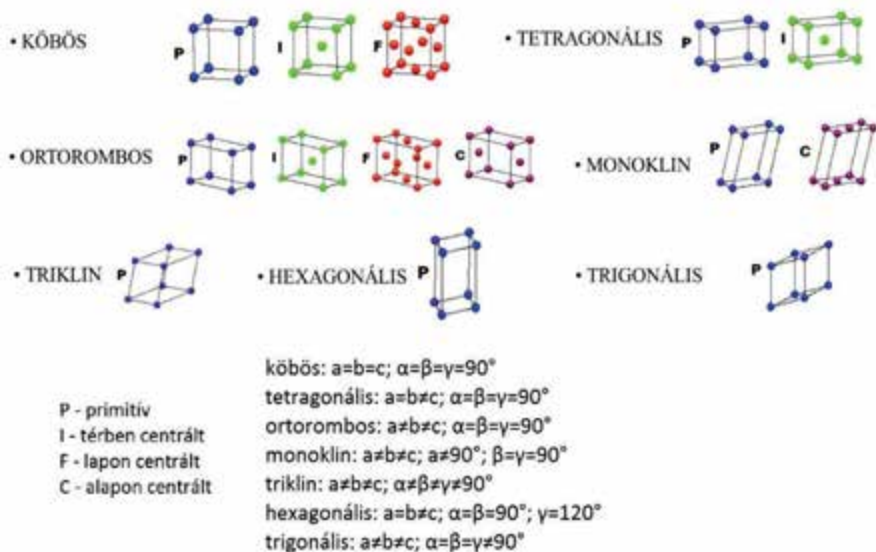
Hét elemi kristályrendszer létezik, ezek a köbös (szabályos), tetragonális, (orto)rombos, monoklin, triklin, hexagonális és trigonális (romboéderes) típusok. Ez a csoportosítás az elemi cella alakjára vonatkozik, de egyúttal a kristály számos fizikai tulajdonsága is ebből adódik. Ezen belül 14 alosztály, és még számos egyéb változat létezik. Jellemzi még az elemi cellát az is, hogy benne hogyan helyezkednek el a részecskék; ez alapján megkülönböztetünk primitív (csak a csúcsokon van részecske), térben centrált (a csúcsokon és az elemi cella közepén van részecske), lapon centrált (csúcsokon és oldallapok közepén) illetve alapon centrált (csúcsokon és a két alapon) fajtákat. A pontok az 1. ábrán az entitások középpontjának elhelyezkedésének egy-egy lehetséges fajtáját mutatják, az adott elemi kristályrendszerre vonatkozóan.

A kristályra további számszerű értékek jellemzőek, ilyenek például a rácsállandó, amely az elemi cella oldalainak hosszát jelenti, vagy a koordinációs szám, amely megmutatja, hogy egy részecskét hány másik vesz körül közvetlenül (egyenlő távolságra). Ez utóbbi a részecskék térkitöltésével korrelál, míg az előbbi (adott körülmények között) az anyagi minőségre jellemző állandó érték. Ezt mondja ki makroszkopikus

---

<sup>1</sup> Ajánlott irodalom: Veszprémi T. (2011): Általános kémia, Akadémiai Kiadó, Bp.; 5.1.3.1-5.1.3.7 fejezet; Náray-Szabó G. (2013): Kémia, Akadémiai Kiadó, Bp.; 4.1.6. fejezet - Röntgendiffrakció; Hargittai I. (1983): Szimmetria, egy kémikus szemével, Akadémiai Kiadó, Bp.

méretre a szögtörvény, mely szerint a kristály lapjai által bezárt szögek nagysága állandó, anyagi minőségre jellemző érték. Ez pedig azt is jelenti, hogy egy tökéletes, makroszkopikus egykristály – azaz tökéletes kristály – megjelenése, alakja (morfológiája) szigorú szabályok által meghatározott.



1. ábra. A hét elemi kristályrendszer, különböző centráltságokkal

Ez a fajta szabályosság jól megfigyelhető természetes eredetű, csiszolatlan kristályokon, ám van, hogy a rendszer annyira eltorzult, és olyan sok benne a kristályhiba – ún. diszlokáció –, hogy látszólag rendezetlen rendszerről van szó, pedig lokális szabályosság itt is megfigyelhető, vagy a makroszkopikus kristály kisebb-nagyobb méretű egykristályokból áll össze (2. ábra).

A fentebb említett centráltság csak a fő irányvonalát adja meg az elemi cellán belül a részecskék elhelyezkedésének. Például, a térben centrált köbös elhelyezkedés mindössze annyit határoz meg, hogy ha az elemi cella egy csúcsában található részecske, akkor a középpontjában is van. Viszont ezen felül is léteznek szabályok az elrendeződésre: 230 féle tércsoport létezik, amelyek ezeket a szabályokat határozzák meg – így például, hogyha bizonyos koordinátánál található részecske, akkor hol

kell még lennie, illetve egyáltalán hol lehet az elemi cellán belül –; az ezt számszerűsítő értékek az ún. Wyckoff-pozíciók. [10]



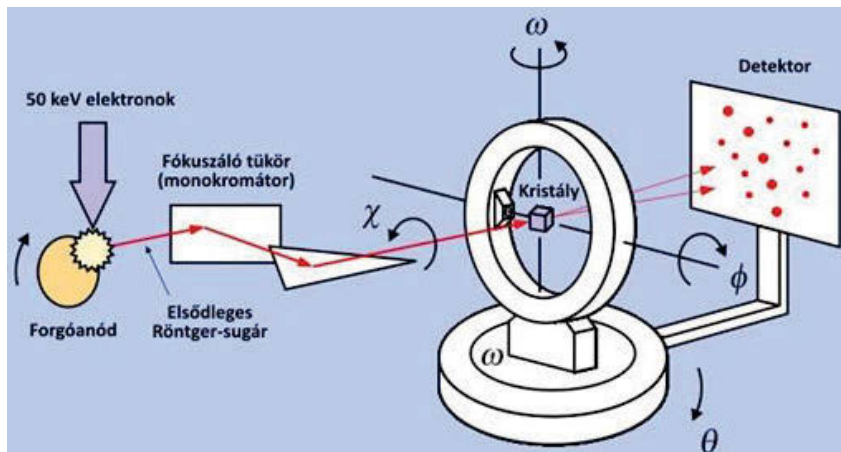
2. ábra. Bal oldalt csiszolatlan gránátkristály, jobb oldalt piritkristály

Az alapján, hogy milyen entitás van a rácspontokon, megkülönböztetünk molekularácsot, ahol a részecskék molekulák, a rácösszetartó erők pedig másodlagos kölcsönhatások (diszperziós-, dipól-dipól kölcsönhatás, vagy hidrogénkötés). Atomrácsban kovalens kötéssel összekapcsolt atomok vannak a rácspontokon. A fémes rács lényege, hogy delokalizált elektronok tartják össze a rácspontokon rezgő fémionokat (fématomtörzseket). Ionrácsban pedig az ellentétes elektromos töltésű kationok és anionok közötti elektrosztatikus kölcsönhatás tartja össze a rácsot. Ebben az esetben megkülönböztethetünk alrácsokat a kationokra és az anionokra vonatkoztatva.

Az azonos összetételű, de különböző kristályrácsfípusú módosulatoknál a polimorfia (elemek esetében allotrópia), míg a különböző összetételű, de hasonló kristályszerkezetű anyagoknál az izomorfia jelenségéről beszélhetünk.

A kristályok szerkezetének legfontosabb vizsgálati módszere a röntgendiffrakció (diffrakció = elhajlás), vagy más néven röntgenkrisztallográfia. A módszer elvi vázolata a 3. ábrán látható; ez azon alapul, hogy a kristályra monokromatikus (azonos hullámhosszú fotonokat tartalmazó) röntgensugarakat bocsátanak, amelyek egy része már külsőbb rétegekről visszaverődik, míg másik részük mélyebben behatol a kristályba, és csak belsőbb rétegek részecskéiről verődik vissza. Az eltérő úthossz fáziskülönbséget okoz a hullámokban, amelyek kilépve interferálnak (erősítés vagy gyengítés) egymással, és az így keletkező interferenciákép detektálható. A detektáló ernyőn ezek következtében

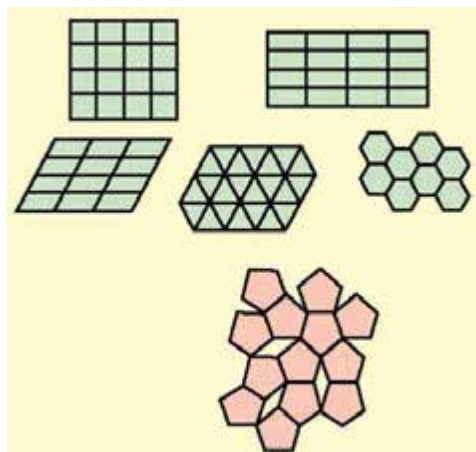
sötétebb és világosabb foltok rajzolódnak ki, ezt nevezzük diffraktogramnak. A kristály vagy a sugárforrás forgatásával különböző diffraktogramokat kapunk; a foltok területének és elhelyezkedésének elemzésével következtethetünk a rácsállandókra és a belső, mikroszkopikus szerkezetre is (de pontosan megállapítani ezeket igen nehéz feladat, és számítógépes analízist igényel, különösen bonyolultabb kristályrendszerek esetén).



3. ábra. A röntgendiffrakció folyamata

### Szimmetriák; a kvázikristályok elméleti háttere és felfedezése

Könnyen belátható, hogy a sík nem tölthető ki hézagmentesen és átfedések nélkül minden alakzattal. Erre csak bizonyos forgási szimmetriákkal rendelkező alakzatok képesek; a szabályos sokszögek közül ennek a feltételnek mindössze a négyzet, téglalap, rombusz (bármely paralelogramma), a háromszög és a szabályos hatszög felelnek meg. Vagyis csak az (1-) 2-, 3-, 4- és 6-fogású forgási szimmetriával rendelkező alakzatok (ez az érték azt mutatja meg, hogy ha egy sokszöget a síkban  $360^\circ$ -kal elforgatjuk, ennek során hányszor kerül fedésbe az eredeti alakzattal) lehetnek képesek erre. Ellenben, könnyen beláthatóan, például a szabályos ötszög nem alkalmas a sík hézag- és átfedésmentes lefedésére (4. ábra).



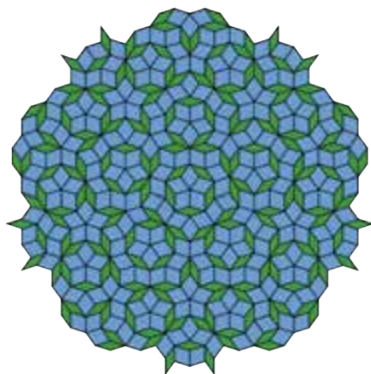
4. ábra. Síkkitöltés különböző sokszögekkel [12]

A hézag- és átfedésmentes lefedés esetei egyféle alakzattal mind periodikus parkettázások, vagyis van bennük olyan legkisebb egység, melyet a sík két irányába a bázisvektorral és annak egész számú többszöröseivel eltolva felépíthető belőlük az egész síkot lefedő rács. Ezekből logikusan következne, hogy ez térben sem lehet másképp, és a háromdimenziós, valódi kristályok is csak ilyen forgási szimmetriákat mutathatnak.

Daniel Shechtman izraeli tudós 1982 áprilisában azonban megdöbbentő felfedezést tett. Hirtelen lehűtött, magas mangántartalmú alumínium-mangán ötvözeteket vizsgálva röntgenkristallográfiás módszerekkel azt tapasztalta, hogy az ötvözetben jelen lévő mikrokristályok tízes forgási szimmetriát mutatnak, amely a kristallográfia hagyományos alapelvei alapján közismerten tiltott szimmetria. Mikor azonban eredményeit publikálni akarta, azokat a tudományos folyóiratok eleinte nem voltak hajlandóak közölni, sokan kigúnyolták őt, és a kor egyik legnagyobb kémikusa, Linus Pauling is komolyan támadta Shechtman megfigyelését (úgy vélte, a kutató csak ikerkristályokat észlelt). Alan L. Mackay – akkor még csak hipotézis szintjén – Shechtman felfedezése után öt hónappal, mikor arról még szinte senki nem tudott, a Magyar Tudományos Akadémián tartott előadást annak a lehetőségéről, hogy egyáltalán nem elvetendő ötlet, hogy a kristályok világában is létezhet ötös szimmetria, amennyiben ikozaéderes fázisokat képzelünk el

(később ez a róla elnevezett, Mackay-féle ikozaéder tette őt híressé). Shechtman csak két évvel ezután, 1984-ben, társszerzőkkel együtt tudott megjelentetni egy olyan közleményt, mely méltó volt a felfedezés jelentőségéhez. Ez hatalmas érdeklődést váltott ki, tanulmányok ezrei követték a bejelentést. Az idő során aztán egyre többen kezdtek foglalkozni a kérdéskörrel, és így egyre több és több kvázikristályt fedeztek fel különböző ötvözetekben (2009-ben természetes eredetű is), és a további vizsgálatokkal, illetve az elméleti háttér kidolgozásával egyértelművé vált Shechtman igaza, aki munkásságáért 2011-ben megkapta a kémiai Nobel-díjat. [1, 7, 8]

Már az 1960-as években felvetődött a kérdés, hogy lehet-e olyan bizonyítottan aperiodikus csempéhalmazt találni, amely hézagmentesen kitölti a síkot. Az első ilyen 1966-ban fedezték fel, és több mint 20 000-féle csempéből állt. Később ez a szám százas, majd tízes nagyságrendre csökkent. Igen sokan foglalkoztak a témával, különböző megközelítéseket alkalmazva. Sir Roger Penrose angol matematikus és elméleti fizikus 1977-ben bizonyítottan aperiodikus csempézést hozott létre kétféle csempéből, egy „vékonyabb” és egy „vastagabb” rombusz felhasználásával. Ezen két alapegység kapcsolódásának szabályai vannak (például soha nem alkothatnak paralelogrammát), melyeket később, a 80-as években olyan szintre fejlesztettek, hogy mindössze lokális szabályokat kell figyelembe venni, azaz a csempézés egy bizonyos részletét egyértelmű módon lehet folytatni bármely irányban. Ez a Penrose-parkettázás nevet kapta, ennek egy részlete látható az 5. ábrán.



5. ábra. A Penrose-parkettázás egy részlete

Erre jellemző, hogy bár szabályos, hiányzik belőle az eltolási szimmetria, így a periodikusság is (a periodikusság a továbbiakban a translációs szimmetria meglétét jelenti). Azonban, egy tetszőlegesen kiválasztott rész véges tartományon belül biztosan ismétlődni fog. [9, 14]

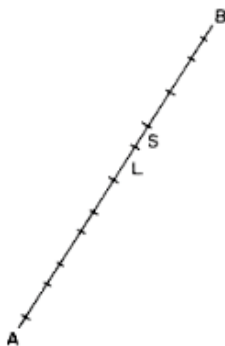
Később a háromdimenziós Penrose-parkettázás (3D Penrose Tiling = 3D PT) kiemelkedően fontosnak bizonyult a kvázikristályok szerkezetének tanulmányozásában, megértésében. A 6. ábrán egy háromdimenziós aperiodikus parkettázás-modellrészlet látható.



6. ábra. Egy minden térirányban aperiodikus térkitöltés modellje

A kvázikristályok olyan, szilárd halmazállapotú anyagok, melyek belső szerkezete rendezett, ugyanakkor nem periodikus. Forgási szimmetriájában megjelenhetnek a hagyományos krisztallográfia által tiltott szimmetriák is (leggyakrabban 5-, 10-, 12-fogású forgási szimmetriatengelyek). A pontos matematikai megfogalmazás szerint biztosan nincs translációs szimmetriájuk  $(n-1)$ -nél több független térirányban, ahol  $n$  a dimenziók száma, amelyen a struktúrát vizsgáljuk, értelmezzük. Ebből az is következik, hogy a három dimenzióban értelmezett kvázikristályoknak lehet periodicitásuk két független térirányban (de nem szükségszerűen), a harmadikban azonban már semmiképpen sem. A szerkezet pontos matematikai leírása és értelmezése igen komplex feladat, és többféle megközelítés is létezik, de mindenképpen összetett számítógépes analízist igényel. A

legelfogadottabb értelmezés a fent említett matematikai szabályból származik, ez a magasabb dimenziókból való projekció; eszerint a kvázikristályok sajátságos, nemperiodikus szerkezete periodikusként értelmezhető 5 vagy 6 dimenzióban (a kvázikristály típusától függően). Ebből kifolyólag a szerkezet nem egyszerűen nemperiodikus, hanem kváziperiodikus. Vagyis vannak bizonyos szabályok, amelyek mindig érvényesek a szerkezetre nézve; ezeket egy ún. kváziperiodikus függvény írja le. A 7. ábrán látható egy vonal, amelyen a hosszú és rövid szakaszok kváziperiodikusan váltakoznak: ez formálisan egy egydimenziós kvázikristály-részletnek is tekinthető. [9, 13, 15]



7. ábra. Kváziperiodikusan ismétlődő szakaszok

### Csoportosításuk, tulajdonságaik, felhasználásuk, kialakulásuk

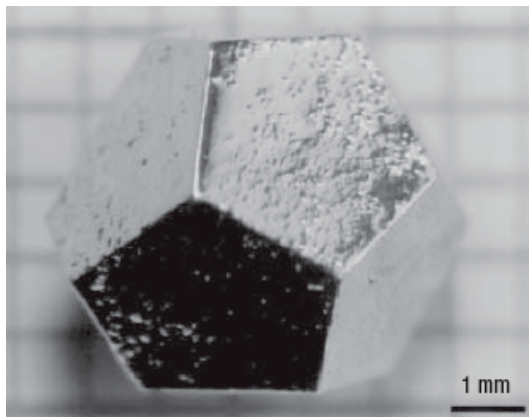
A kvázikristályok csoportosítása történhet stabilitásuk alapján: megkülönböztetünk stabil és metastabil rendszereket. Az alkotóelemek száma alapján kétkomponensű (bináris) és többkomponensű kvázikristályokat (leggyakrabban három elemből állnak) különíthetünk el; egykomponensű jelenlegi tudásunk szerint nincs.

Fontosabb azonban a belső szerkezeten alapuló csoportosítás. Ezen rendszerezés alapján léteznek poligonális (azaz sokszöges), illetve ikozaéderez kvázikristályok. Míg előbbieken egy 8/10/12 fogású forgási szimmetriatengely van, és ezen tengely mentén periodikusak, de erre merőlegesen nem, addig utóbbiak minden irányban aperiodikusak.

Előfordulhatnak kvázikristályok az alumínium mesterségesen előállított ötvözeteiben, és egyéb ötvözetekben (például Al-Mn-Si, Al-Ni-Co, Al-Pd-Mn, Al-Li-Cu, Al-Mn, Zn-Mg-Ho, Cd-Ca, Cd-Yb, Ti-Mn) –



bizonyos összetételek mellett. Ezen mesterséges anyagokon kívül meteoriteredetű és földi eredetű, természetes kvázikristályt is találtak már. A 8. ábrán egy Zn-Mg-Ho kvázikristály látható, dodekaéderes alakkal, amely egyúttal dodekaéderes elemi cellával is rendelkezik. [12]



8. ábra. Egy dodekaéderes morfológiájú Zn-Mg-Ho kvázi-egykrisztály

Előállításuk történhet meghatározott összetételű fémolvadékok nagyon gyors hűtésével (így nincs ideje szétválni a fázisoknak és mikrokristályokat alkotni), vagy amorf anyagok kristályosításán alapuló módszerekkel. Igen változatos tulajdonságokkal rendelkeznek: típustól és összetételtől függően többnyire rugalmasak, mindazonáltal kemények és jó kopásállósággal rendelkeznek. Általában elektromos szigetelők, de a körülményeknek megfelelően félvezetőkké vagy szupravezetőkké válhatnak, felhasználásuk szempontjából rendkívül kedvező adatokkal bírnak. Ezen kitűnő tulajdonságaiknak köszönhetően egyre több területen használják őket: bevonatok, védőfelületek kialakítására, precíziós műszerek gyártására, elektromos és mágneses szigetelőanyagként, rétegek szilárdságának növelésére, illetve radioaktív sugárzás felfogására. Egyelőre viszont széleskörű ipari használatuknak gátat szab magas előállítási költségük. [12]

Kialakulásuk és annak feltételei egy még nem teljesen felderített téma, csak empirikus megfigyeléseink és azokból levont következtetések állnak rendelkezésre; a modellezéssel való előrejelzés szinte kivitelezhetetlen ebben az esetben, hiszen igen komplex rendszerekről van szó, amelyeknek nagy a kezdeti feltételekre való érzékenysége.

Ennek demonstrálására vizsgáljuk a kadmium-ritkaföldfém rendszereket. Ezek közül csak a Cd-Yb rendszerben tudnak kialakulni kvázikristályok. Ismeretes továbbá, hogy a Cd-Ca rendszerben is létezik bináris kvázikristályos fázis. A kialakulás ebből adódóan vélhetőleg szoros kapcsolatban van a vegyértékelektron-szerkezettel: mindössze két ritkaföldfém, az Yb (itterbium) és az Eu (európium) ( $[Xe] 4f^{14} 6s^2$  illetve  $[Xe] 4f^7 6s^2$ ) két vegyértékű a Ca-hoz hasonlóan; az Yb f-alhéja teljesen feltöltött, zárt, az Eu-é félig feltöltött. Az Eu viszont mégsem alkot Cd-mal kvázikristályokat. A másik fő befolyásoló tényező feltételezhetőleg az atomsugár;  $r(\text{Ca}) = 198$  pm, ez 4 pm-rel tér el  $r(\text{Yb}) = 194$  pm-től; és 6 pm-rel  $r(\text{Eu}) = 204$  pm-től. Látható, hogy igencsak esetleges a különbségekből való következtetés, hiszen a 6 pm-es atomsugárbeli különbség már elegendő ahhoz, hogy ne képződjön kvázikristály. Ez persze összefügghet az elektronszámmal is; az európiumatomban mindössze 63 elektron van, míg az itterbium-atomban 70. A kvázikristályok kialakulásának a komponensek egyéb tulajdonságaival való kapcsolatának felderítése továbbra is várta magára. [3]

### Szerkezet, közelítések, modellezés

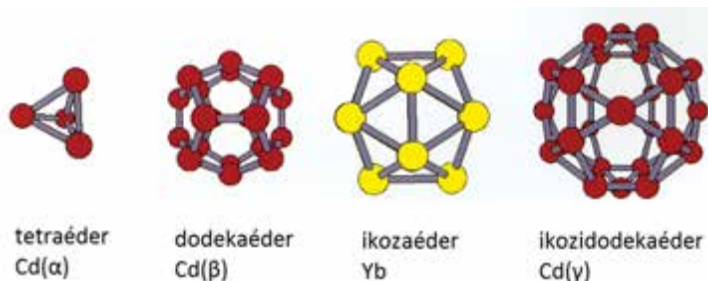
A kvázikristályok szerkezetének modellezése és vizsgálata, matematikai leírásukhoz hasonlóan igen nehéz feladat, illetve egy ma is kutatott terület. A belső struktúra tanulmányozására igen jó lehetőséget nyújtanak az ún. (köbös) kristályos közelítő szerkezetek. A kristályos közelítő szerkezet olyan fázis, amely hasonló vagy azonos összetételű, és elemi cellája olyan atomi elrendeződéseket tartalmaz, mint a kvázikristály, például ikozaéderes klasztereket; ám mégis periodikus (hiszen van elemi cellája, jóllehet az többnyire igen sok atomot tartalmaz).

A kvázikristályok, illetve közelítő struktúráik szerkezete jól demonstrálható a Cd-Yb rendszerben bizonyos összetételek mellett képződő kvázikristályok vizsgálatán, modellezésén keresztül. A Cd-Yb rendszer volt az elsőként felfedezett termodinamikailag stabil, kétkomponensű kvázikristály (Shechtman eredeti Al-Mn kvázikristálya metastabil volt, hőkezelés hatására könnyen átkristályosodott). A. P. Tsai, J. Q. Guo, E. Abe, H. Takakura és T. J. Sato fedezték fel 2000-ben, indukciós kemencében készített  $\text{Cd}_{5,7}\text{Yb}$  összetételű olvadék Ar-atmoszféra alatti megszilárdításával (eljárásuk során Cd-Mg-

ritkaföldfém rendszereket vizsgáltak, majd abból fokozatosan kihagyták a Mg-komponenst). A minta röntgendiffrakciós vizsgálata során megállapították, hogy abban 2-, 3- és 5-fogású forgási szimmetriatengelyek vannak, melyek arra utaltak, hogy abban kvázikristályos szerkezet alakult ki, hosszútávú ikozaédes renddel (az ikozaéder egyike az öt szabályos testnek, tizenöt kétfogású-, tíz háromfogású-, és hat ötfogású forgástengelye van). A termodinamikai stabilitásról hőkezeléssel győződtek meg. [4]

A  $Cd_{5.7}Yb$  közelítő szerkezetének kitűnő jelölt a  $Cd_6Yb$  kristály, ugyanis diffrakciós képeik jó egyezést mutatnak, összetételük hasonló, és rácsparamétereik aránya megfelel az elméletileg levezetett összefüggésnek. Ez egy igen bonyolult kristály, a belső struktúrájának szemléltetésére két mód is létezik, ebből az egyiket fogjuk részletesen tárgyalni.

Ez a klaszteres megközelítés, mely szerint az elemi cella felfogható úgy, mint különböző kadmium és itterbium klaszterek térben centrált köbös elhelyezkedése, illetve a klaszterek közötti „szabad” Cd atomok,  $Im\bar{3}$  tércsoport szerinti elrendeződési szabályokkal. A klaszterek 66 atomot tartalmaznak, és a  $Cd_{54}Yb_{12}$  összetétellel jellemezhetőek. Négy, egymásba illeszkedő héjból állnak, melyeket rendre az Yb, Cd( $\alpha$ ), Cd( $\beta$ ) és Cd( $\gamma$ )-ok alkotnak (a görög betűk különböző ekvivalens pozíciókat jelölnek). [4, 10]

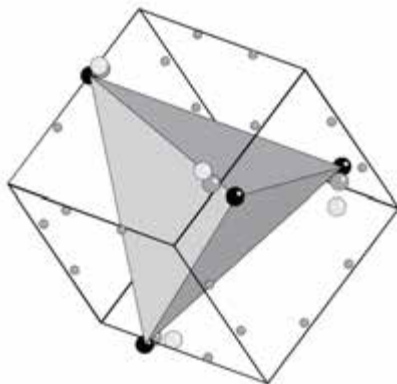


9. ábra. Klaszterek a  $Cd_6Yb$  fázisban, balról jobbra és bentről kifelé haladva [4]

Az legbelső héj négy Cd( $\alpha$ ) atomból áll, miközben nyolc atomi pozíció – 8 Cd( $\alpha$ ) – helyezkedik el ebben kocka alakzatban, így a betöltöttségi faktor  $\frac{1}{2}$ ; a négy Cd torzult tetraédert formál. Ezen torzult tetraéderek orientációja még igen vitatott: számos lehetséges elhelyezkedés van a dodekaéderen belül, és még több, amennyiben vizsgáljuk az egymás

melletti klaszterek orientációit és ezek kölcsönös befolyásoló hatását is. Ráadásul 110 K környékén egy fázisátalakulás is megfigyelhető a rendszerben: az átmenet alatti hőmérséklet felett a rendezett klaszterorientációk szabálytalanná válnak, és egyre több olyan alakúvá torzult tetraéder jelenik meg, mely az előzetes modellezések alapján nem kedvezményezett (néhány lehetőséget jeleznek a pontok illetve a berajzolt tetraéder a 10. ábrán). [6]

A második (a tetraédert bennfoglaló) héj 20 Cd atomból áll – 20 Cd( $\beta$ ) –, ezek egy szabályos dodekaédert formálnak. A harmadik héj 12 ikozaéderesen elhelyezkedő Yb atomból áll. Ezek sztérikus okok miatt kiszorulnak a második héj Cd atomjai által alkotott ötszögek középpontjából, és kicsivel kijebb helyezkednek el. A negyedik (legkülső) héj 30 Cd atomból áll – 30 Cd( $\gamma$ ) – melyek pontosan a harmadik héj által alkotott ikozaéder éleinek közepén helyezkednek el, ikozidodekaéderes alakzatban. Ha a 9. ábrán látható klasztereket egymásba toljuk, kirajzolódik, hogy a héjak milyen pontosan tudnak egymásba illeszkedni. [2]

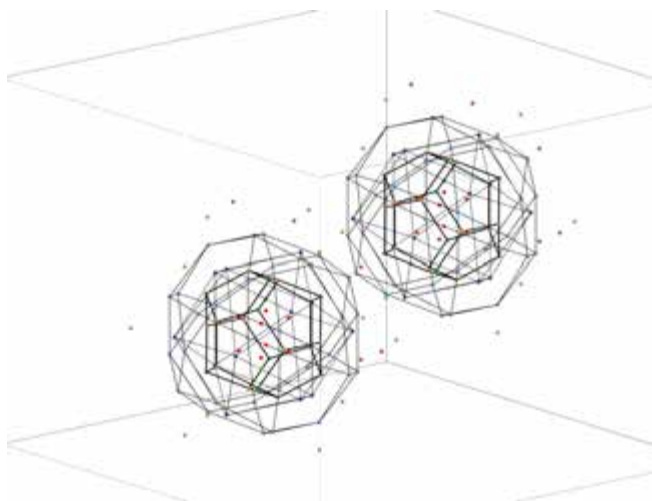


10. ábra. A belső tetraéder néhány lehetséges orientációja szürke pontokkal jelölve, és a legkedvezőbb elrendeződés kirajzolva [6]

A kristály elemi cellája két ilyen klasztert tartalmaz; ráadásul az ideális (számított) adatokhoz képest torzulásokkal, vagyis a reális klaszter nem ugyanolyan, mint az ideális (a 11. ábrán látható két reális klaszter, a körülöttük elhelyezkedő további kadmiumatomokkal együtt, a szemléletesség érdekében a klaszterek alakját kirajzoló

segédvonalakkal). Továbbá, a klaszterek a valóságban feldarabolódnak az elemi cellás kristálytani leírásban, így az elemi cella nem ilyen formában tartalmazza a klasztereket illetve a már említett „szabad” atomokat. Azaz, a klaszteres forma akkor kapható meg, ha a legkisebb alapegység több eltoltját együtt vizsgáljuk (vagyis egy véges kristályrácstarabot).

Magának a kvázikristálynak a szerkezetét már sokkal nehezebb szemléletesen megmutatni (tekintve hogy nem periodikus), azonban elméleti síkon a legegyszerűbb megfogalmazás, hogy leírható különböző, torzult szerkezeti elemek kváziperiodikus elrendeződéseként.



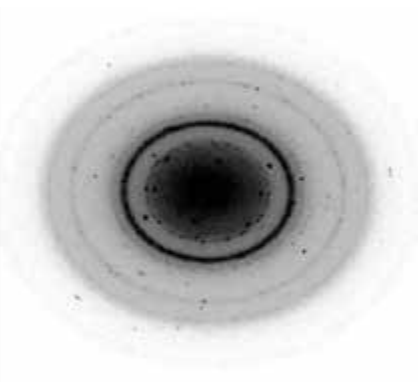
11. ábra. Két reális klaszter és a klaszteren kívüli kadmium atomok

## A kristály modern értelmezése

A kristály már említett, hagyományos definícióját 1991-ben pontosította a Nemzetközi Kristallográfiai Unió, mégpedig úgy, hogy a diffrakciós kép alapján meg lehessen ítélni, hogy a minta kristálynak

tekintendő-e; ez alapján már a kvázikristályok is kristálynak számítanak. Az új definíció szerint kristály az, ami a röntgendiffrakció során ún. Bragg-diffrakciós képet alkot, azaz, amelynek diffraktogramján diszkrét „pontok” jelennek meg. [9, 11]

Téves az az értelmezés – amely egy már régen megállapított matematikai törvény félreértelmezéséből adódott, és a kvázikristályok felfedezéséig senki nem vitatta –, miszerint kizárólag belső szerkezetükben periodikus szilárd anyagok diffrakciós képen jelenhetnek meg diszkrét pontok. Valójában a majdnem teljesen periodikus – így a kváziperiodikus kristályok is – képesek erre, egyedül a szabálytalan, amorf anyagok nem. Ez látható a 12. ábrán; balra egy kvázikristály diffraktogramja, rajta diszkrét pontokkal, míg jobbra egy amorf anyagé, éles határok és diszkrét pontok nélkül. [9]



12. ábra. Különböző röntgendiffrakciós képek, balra egy kvázikristályé (ez a tízfogású forgási szimmetriából megállapítható), jobbra egy amorf anyagé

*A projekt megvalósulását a Nemzeti Tehetség Program keretein belül az Emberi Erőforrás Támogatáskezelőn keresztül az Emberi Erőforrások Minisztériuma támogatta.*

## Irodalom

- [1] Shechtman, D., Blech, I., Gratias, D., Cahn, J. W.: Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry; *Physical Review Letters*, vol. 53., **1984**.
- [2] Takakura, H., Guo, J. Q., Tsai, A. P.: Crystal and quasicrystal structures in Cd-Yb and Cd-Ca binary alloys; *Philosophical Magazine Letters*, vol. 81., **2001**.
- [3] Guo, J. Q., Abe, E., Tsai, A. P.: Stable icosahedral quasicrystals in binary Cd-Ca and Cd-Yb systems; *Physical Review B*, vol 62., **2000**.
- [4] Tsai, A. P., Guo, J. Q., Abe, E., Takakura, H., Sato, T. J.: A stable binary quasicrystal; *Nature*, vol. 408., **2000**.
- [5] Elser, V., Henley, C. L.: Crystal and quasicrystal structures in Al-Mn-Si alloys; *Physical Review Letters*, vol. 55., **1985**.
- [6] Brommer, P., Gähler, F., Mihalkovi, M.: Ordering and correlation of cluster orientations in CaCd<sub>6</sub>; *Philosophical Magazine*, **2010**.
- [7] Hargittai István: A kvázikristály többé már nem kvázi...; *Magyar Kémikusok Lapja*, 66. évf., 12. szám, **2011**.
- [8] Hargittai István: Újabb anyagtudományi Nobel-díj: Dan Shechtman és a kvázikristályok felfedezése; *Fizikai Szemle*, 11. szám, **2011**.
- [9] Tasnádi Tamás: Rend, rendezetlenség, szimmetriák című előadása (2015. szeptember 25.)
- [10] [www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-wp-list?gnum=204](http://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-wp-list?gnum=204)
- [11] Oberhaus, D.: Quasicrystals are nature's impossible matter [motherboard.vice.com/read/quasicrystals-are-natures-impossible-matter](http://motherboard.vice.com/read/quasicrystals-are-natures-impossible-matter)
- [12] Princeton: Quasicrystals cikkei [www.phy.princeton.edu/~steinh/quasicrystals.html](http://www.phy.princeton.edu/~steinh/quasicrystals.html)
- [13] Jcrystal: Quasicrystals, <http://www.jcrystal.com/steffenweber/qc.html>
- [14] Enciclopedia Britannica: Quasicrystal [www.britannica.com/science/quasicrystal](http://www.britannica.com/science/quasicrystal)
- [15] EnWikipedia: Quasicrystal [en.wikipedia.org/wiki/Quasicrystal](http://en.wikipedia.org/wiki/Quasicrystal)