

Kvázikristályok és közelítő szerkezeteik

Botlik Bence Béla - Gyűrűs Boldizsár - Herczeg Donát

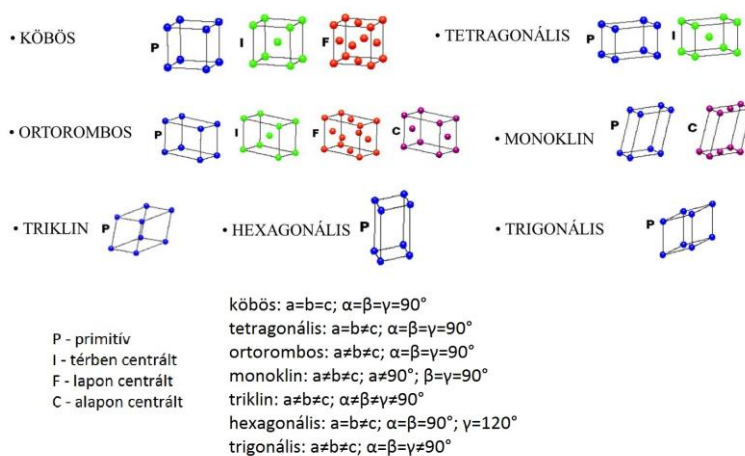
I. Kristálytani összefoglaló¹

Kristályokkal a krisztallográfia, vagy más néven a kristálytan tudományága foglalkozik. A hagyományos definíció szerint kristálynak azokat a szilárd halmazállapotú anyagokat nevezük, 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 (romboéderez) típusok. Ez a csoportosítás az elemi cella alakjára vonatkozik, de egyúttal a kristály számos fizikai tulajdon-

sága 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 méretre a szögtörvény, mely szerint a



1. ábra; A hét elemi kristályrendszer, különböző centráltságokkal {1}

¹ 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.

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

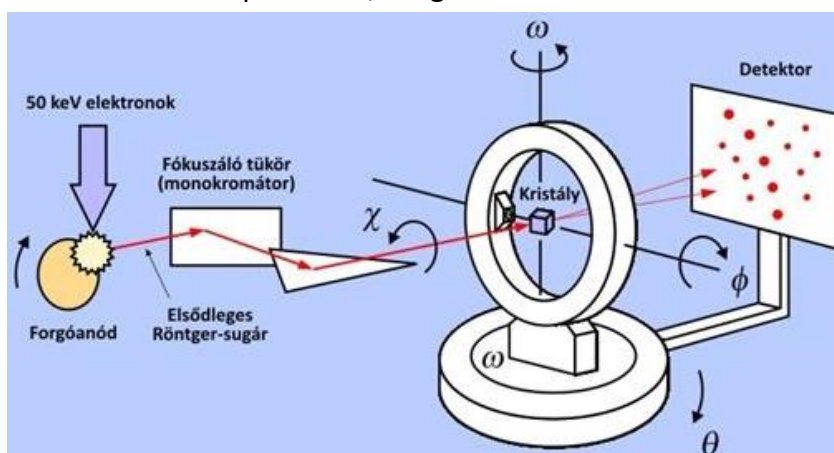


2. ábra; Bal oldalt csiszolatlan gránátkristály, jobb oldalt piritkristály {2}

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]

Az alapján, hogy milyen entitás van a rácspontokon, megkülönböztetünk molekularácsot, ahol a részecskék molekulák, a rácsozartató erők pedig másodlagos kölcsönhatások (diszperziós-, dipól-dipól kölcsönhatás, vagy hidrogénkötés). Atomrácokban kovalens kötéssel összekapcsolt atomok vannak a rácspontokon. A fémes rács lényege, hogy delokalizált elektronok tartják össze a rácspontokon



3. ábra; A röntgendiffrakció folyamata {3}

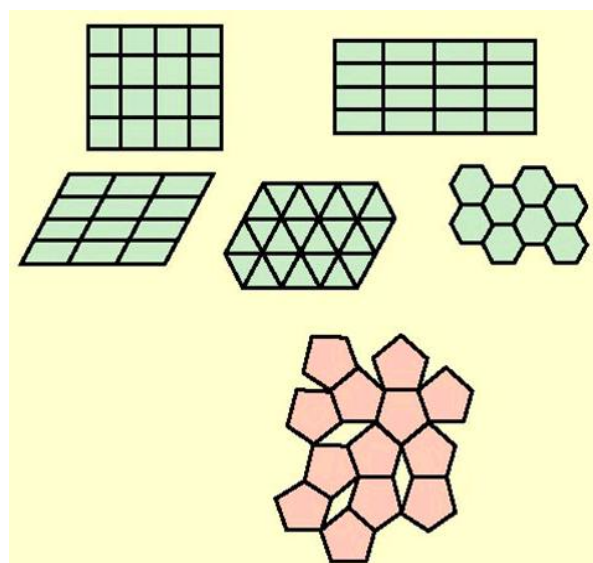
rezgő fémionokat (fématomtörzseket). Ionrácokban pedig az ellentétes elektromos töltésű kationok és anionok közötti elektrosztatikus kölcsönhatás tartja össze a rácsot. Ebben az esetben megkülönböztethetünk alrácsokat a kationokra és az anionokra vonatkoztatva.

Az azonos összetételű, de különböző kristályrács típusú 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 röntgenkristallográfia. A módszer elvi vázlata 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 interferenciakép 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).

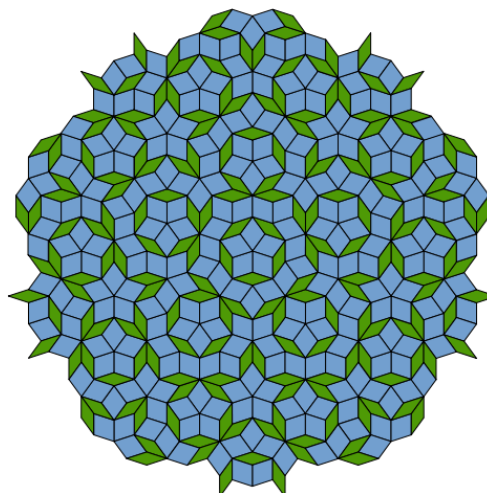
II. Szimmetriák; a kvázikristályok elméleti háttere és felfedezése

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° -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). 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.



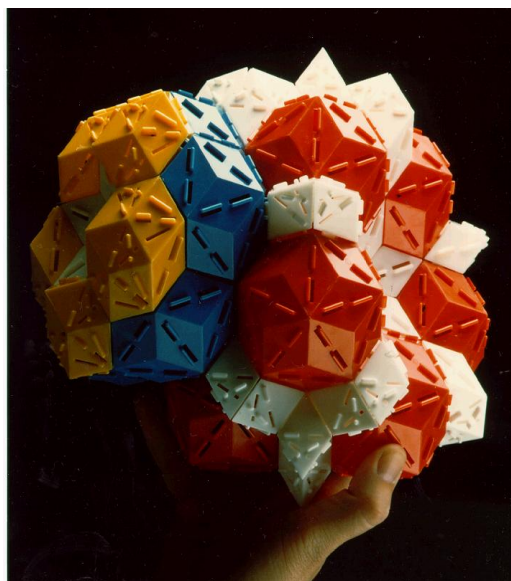
4. ábra; Síkkitöltés különböző sokszögekkel {4}

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 hajlandók 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 ikozaédes 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 eredetűt 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]



5. ábra; Penrose-parkettázás egy részlete {5}

Már az 1960-as években felvetődött a kérdés, hogy lehet-e olyan bizonyítottan aperiodikus csempehalmazt 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

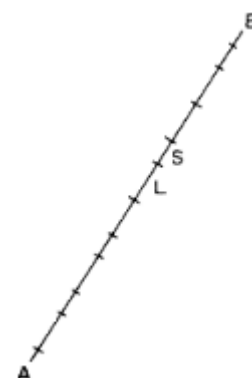


6. ábra; Egy minden térirányban aperiodikus térkitöltés modellje {6}

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. 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 tet-szőlegesen 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.

A kvázikristályok olyan, szilárd halmazállapotú anyagok, melyek belső szerkezete rendezett, ugyanakkor nem periodikus. Forgási szimmetriájában megjelenhetnek a hagyományos kristallográfia 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 sajátos, 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 kvázikristályrészletnek is tekinthető. [9][13][15]



7. ábra; Kváziperiodikusan ismétlődő szakaszok {7}

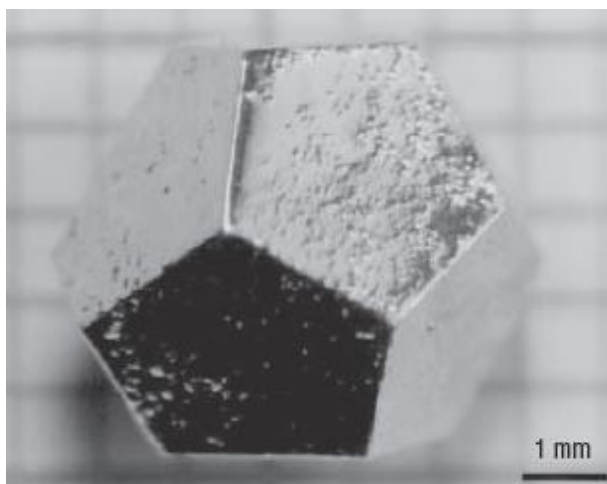
III. Csoportosításuk, tulajdonságaik, felhasználásuk, kialakulásuk

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 ikozaéderes 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, dodekaédes alakkal, amely egyúttal dodekaédes elemi cellával is rendelkezik. [12]

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]



8. ábra; Egy dodekaédes morfológiájú Zn-Mg-Ho kvázikristály [8]

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 $[Xe] 4f^7 6s^2$) kétvegyértékű 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; $r(Ca)=198$ pm, ez 4 pm-rel tér el $r(Yb)=194$ pm-től; és 6 pm-rel $r(Eu)=204$ 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 európium atomban mindössze 63 elektron van, míg az itterbium atomban 70. A kvázikristályok kialakulásának a komponensek egyéb tulajdonságaival való kapcsolatának felderítése továbbra is várat magára. [3]

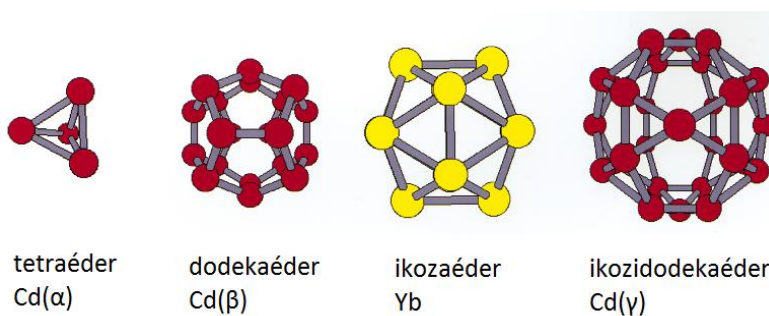
IV. Szerkezet, közelítések, modellezés

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 ikozaédes klasztereket; ám mégis periodikus (hiszen van elemi cellája, jóllehet az többnyire igen sok atomot tartalmaz).

A kvázikristályok illetve közelítő struktúráik szerkezete jól demonstrálhatók a Cd-Yb rendszerben bizonyos összetételek mellett képződő kvázikristályok vizsgálatán, modellezésén keresztül. A Cd-Yb rendszer volt az elsőként felfedezett termodinamikailag stabil, két-komponensű 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 $Cd_{5,7}Yb$ 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]

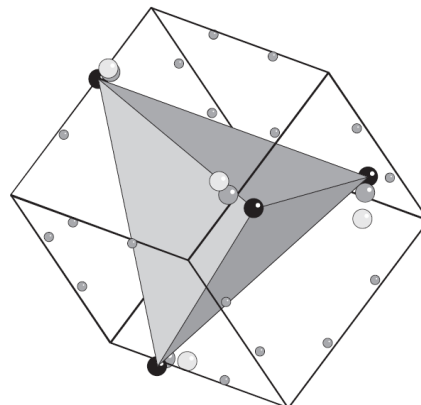
A $Cd_{5,7}Yb$ közelítő szerkezetének kitűnő jelölt a Cd_6Yb kristály, ugyanis diffrakciós képeik jó egyezést mutatnak, összetételük hasonló, és rácsparamétereik aránya megfelel az elméletileg levezetett összefüggésnek. Ez egy igen bonyolult kristály, a belső struktúrájának szemléltetésére két mód is 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, $Im-3$ tércsoport szerinti elrendeződési szabályokkal. A klaszterek 66 atomot tartalmaznak, és a $Cd_{54}Yb_{12}$ összetétellel jellemezhetőek. Négy, egymásba illeszkedő héjből állnak, melyeket rendre az Yb, Cd(α), Cd(β) és Cd(γ)-ok alkotnak (a görög betűk különböző ekvivalens pozíciókat jelölnek). [4][10]



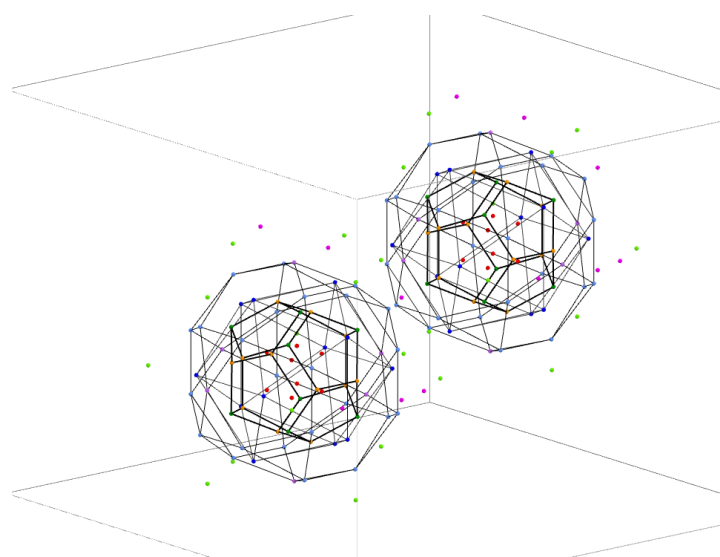
9. ábra; Klaszterek a Cd_6Yb fázisban, balról jobbra és bentről kifelé haladva [9]

Az legbelső héj négy Cd(α) atomból áll, miközben nyolc atomi pozíció – 8 Cd(α) – 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]



10. ábra; A belső tetraéder néhány lehetséges orientációja szürke pontokkal jelölve, és a legkedvezőbb elrendeződés kirajzolva {10}

A második (a tetraédert bennfoglaló) héj 20 Cd atomból áll – 20 Cd(β) –, 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(γ) – 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]



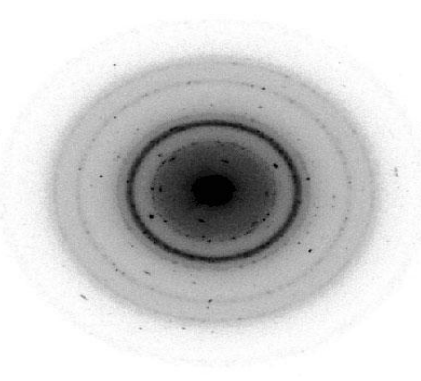
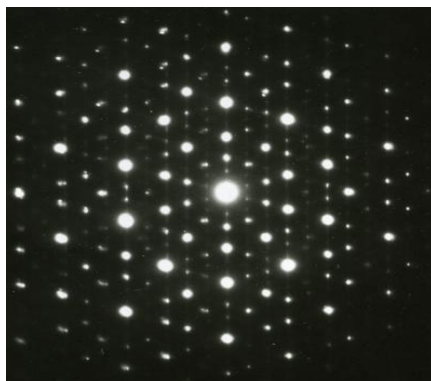
11. ábra; Két reális klaszter és a klaszteren kívüli kadmium atomok {11}

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 kadmium atomokkal 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 eltöltjét együtt vizsgáljuk (vagyis egy véges kristályrácsdarabot).

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.

V. A kristály modern értelmezése

A kristály már említett, hagyományos definícióját 1991-ben pontosította a Nemzetközi Krisztallográfiai 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]



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

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 15. ábrán; balra egy kvázikristály diffraktogramja, rajta diszkrét pontokkal, míg jobbra egy amorf anyagé, éles határok és diszkrét pontok nélkül. [9]

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



VI. Források

- [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, Veit - Henley, Christopher 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_6 ; *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] dr. Tasnádi Tamás: Rend, rendezetlenség, szimmetriák című előadása (2015. SZEPTEMBER 25.)
- [10] Im-3 tércsoport Wyckoff-pozíciói
www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-wp-list?gnum=204
- [11] Daniel Oberhaus: Quasicrystals are nature's impossible matter
motherboard.vice.com/read/quasicrystals-are-natures-impossible-matter
- [12] Princeton: Quasicrystals cikkei
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)
- [15] EnWikipedia: Quasicrystal
en.wikipedia.org/wiki/Quasicrystal)

Képek forrásai:

{1} A slideshare.net-en lévő prezentációból kivett kép magyar nyelvre fordítva, kiegészítve, átszerkesztve
www.slideshare.net/umairbukhari3/crystal-systems

{2}

https://hu.wikipedia.org/wiki/Gr%C3%A1n%3C%A1n%C3%A1tcsoport#/media/File:Granat,_Madagaskar.JPG

<http://szintia.web.elte.hu/images/asvanyok/pirit.jpg>

{3} www2.sci.u-szeged.hu/inorg/MOMA/ch07s03.html

{4} www.phy.princeton.edu/~steinh/quasicrystals.html
What are quasicrystals? prezentáció

{5} en.wikipedia.org/wiki/Penrose_tiling#/media/File:Penrose_Tiling_%28Rhombi%29.svg

{6} tenzorro.livejournal.com/8150.html

{7} Saját készítésű ábra

{8} upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/9/92/Ho-Mg-ZnQuasicrystal.jpg

{9} Tsai, A. P. - Guo, J. Q., - Abe, E. - Takakura, H. - Sato, T. J.: A stable binary quasicrystal;
Nature, vol. 408., 2000.

{10} Brommer, P., Gähler, F., Mihalkovi, M.: Ordering and correlation of cluster orientations in CaCd₆; *Philosophical Magazine*, 2010.

{11} Saját készítésű ábra