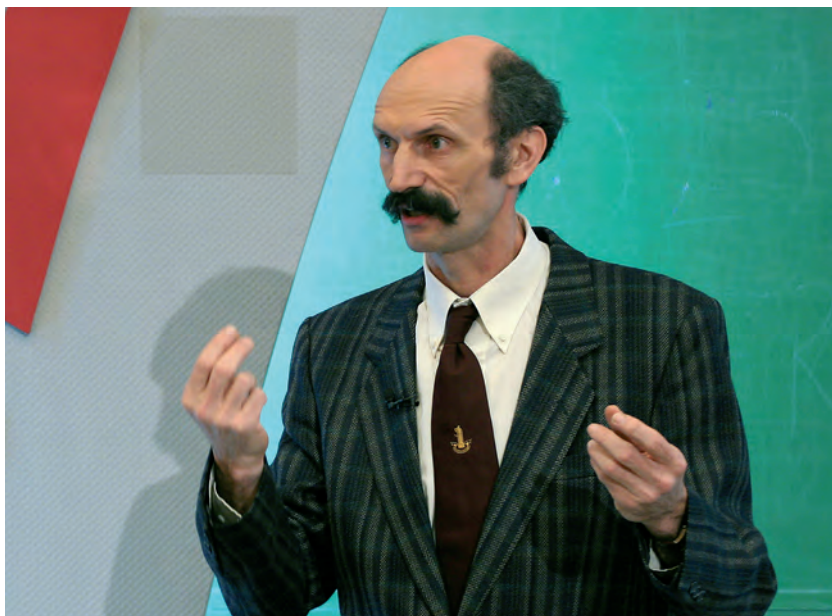


FAIGEL GYULA

Mire jó a röntgenvonalzó?



Faigel Gyula
fizikus
az MTA levelező tagja

1954-ben született Ormosbányán. 1979-ben diplomázott az ELTE Természettudományi Karának fizikus szakán. 1988-ban a fizikatudomány kandidátusa, 1998-ban akadémiai doktora lett; 2001-től az MTA levelező tagja.

Pályáját 1979-ben az MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutató Intézetében kezdte, jelenleg a röntgendiffrakciós csoport vezetője. 1985–1987 között az egyesült államokbeli Brookhaven Nemzeti Laboratórium Szinkrotron forrásánál dolgozott. Több új méréstípus (például a szinkrotron-sugárzás nukleáris rezonanciaszórása, röntgenholográfia) bevezetésénél vezető kutató.

Fő kutatási területe: nukleáris rezonanciaszórás a szilárdtestfizikában, atomi felbontású röntgenholográfia.

Az atomi szerkezet meghatározása röntgensugárzással

A mai technikai civilizációinkban mind több és mind kifinomultabb eszközt használunk. Az ezeket felépítő anyagok tulajdonságait egyre pontosabban kell ismerni, és képesnek kell lenni arra, hogy ezeket az igényekhez igazítsuk. A tulajdonságokat alapvetően az alkotó atomok milyensége és térbeli rendje, vagyis az atomi szerkezet határozza meg. E szerkezet pontos ismerete elengedhetetlen ahhoz, hogy jó és megbízható gépkocsikat, elektronikus eszközöket vagy éppen orvosságokat állítsunk elő. A kérdés fontosságát talán az is mutatja, hogy az elmúlt száz évben számos módszert dolgoztak ki az atomi szerkezet meghatározására. Ezek közül a legszélesebb körben elterjedt a röntgensugárzással való szerkezetmeghatározás. Az ezzel kapcsolatos kísérleti és elméleti munkákért kilenc Nobel-díjat adtak. Az előadás keretében bemutatjuk a röntgensugárzással való atomi szerkezetmeghatározás alapelveit, nehézségeit, és kitérünk a jövőbeli lehetőségekre is.



Bevezetés

Ha felteszem a kérdést: melyik érzékszervünkön keresztül kapjuk környezetünkéről a legtöbb információt, azt hiszem, rövid gondolkodás után a nagy többség azt válaszolja, hogy a szemünkön keresztül. A testek térbeli elhelyezkedése és milyensége alapvető jellemzője környezetünknek, ezek az információk majdhogynem elengedhetetlenek a világban való boldogulásunkhoz. A fenti megállapítás nemcsak a látható világban, a makroszkopikus objektumok esetén érvényes, hanem a mikrovilágban – vagy manapság divatosan: a nanovilágban –, az atomok szintjén is. Ugyanis a minket körülvevő anyagok jellegzetes tulajdonságai a bennük található atomi renddel szoros kapcsolatban vannak.

Az atomi rend pontos ismerete különösen fontos korunk technikai civilizációja számára, melyben mind több és mind kifinomultabb eszközt, tárgyat használunk. Nézzük például a gyógyszereinket. Ezek hatásmechanizmusát akkor tudjuk teljes mélységében megérteni, ha egészen az atomi szintig követjük az átalakulásokat, amelyekkel a hatóanyag molekulái beépülnek a szervezetbe. Ezen túl a gyógyszergyártás folyamán folytonos ellenőrzésre van szükség, hogy mindig pontosan a megfelelő anyagot állítsuk elő. Ez az ellenőrzés egészen az atomi szintig terjed. Hasonló a helyzet egészen más területeken is, például a repülőgépekben használt szuperötvözetek gyártásánál vagy a félvezető eszközök előállításánál.

Ezért nem meglepő, hogy az atomi szerkezet meghatározására alkalmas módszerek kifejlesztésére igen nagy erőket összpontosítottak az elmúlt száz évben, és ez jelenleg is aktív kutatási terület. A köztudatban ezek a munkák nem igazán ismertek. Viszont az e módszerekkel elért eredményekről talán többet hallunk. Nézzük például a DNS-t, amelyről biztosan mindenki hallott. De arról, hogy miként határozták meg szerkezetét, milyen hatalmas szellemi teljesítmény és munka rejlik a módszerek kifejlesztése mögött, amelyet Nobel-díjjal ismertek el, arról már sokkal kevesebben tudnak. Ebben az előadásban erről a munkáról, az atomi szerkezet meghatározásáról lesz szó, pontosabban ennek is csak egy szeletéről: a röntgensugárzással való szerkezetmeghatározásról. E problémakör súlyát, fontosságát az is jelzi, hogy speciálisan a röntgensugárzással való szerkezetmeghatározással kapcsolatos kutatásokért kilenc Nobel-díjat ítéltek oda.

A vonalzó

Felvetődik a kérdés: hogyan kapcsolódik a **röntgensugárzás** és az atomi szerkezet? Miért éppen a röntgensugárzással kaphatunk információt az atomok térbeli elhelyezkedéséről? Ahhoz, hogy ezt megválaszoljuk, tekintsük át először a mérés folyamatát. Mi kell egy méréshez? Természetesen a mérendő tárgy, a mérőeszköz és az ember, aki elvégzi a mérést, leolvassa az

Röntgensugárzás:

olyan elektromágneses sugárzás, melynek hullámhossza az angström-tartományba esik.

Angström:

hosszmértékegység, melyet az atomi méretek tartományában használnak, 1 angström = 10^{-10} m.

Hullám:

a hullám térben és időben periodikus jelenség, ami azt jelenti, hogy a hullámhossz vagy periódusidő egészszámszorásával eltolva ugyanolyan értéket vesz fel; matematikai formában $A(t, x) = A(t + nT, x + mL)$, ahol n és m egész számok, T a periódusidő, L pedig a hullámhossz.

Monokromatikus:

olyan hullám, amelyben csak egyetlen hullámhossz fordul elő.

Hullámhossz:

a hullám két nullpontja közötti távolság, miközben a hullám egy minimumon és maximumon is átmeleg.

Fázis:

a hullámok egyik jellemző paramétere, amely azt adja meg, hogy egy adott viszonyítási ponthoz képest a hullám egy másik pontja a hullámhossz hány-szorosával van távolabb.

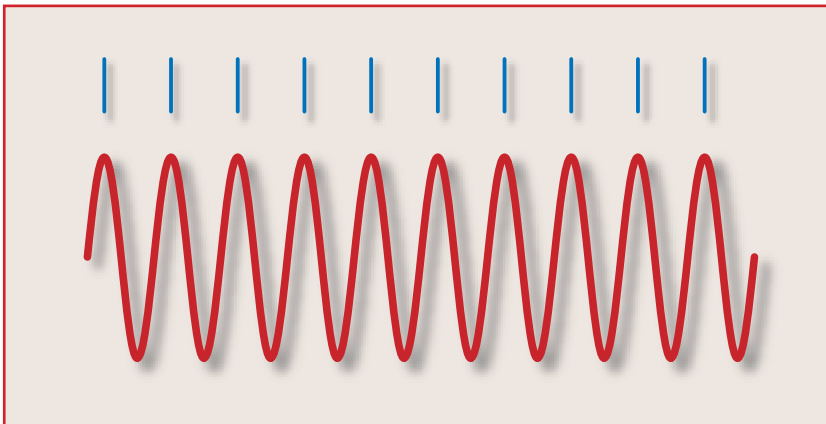
eredményt – tudományosan szólva kiértékeli a mérést. Szemléltessük ezt egy egyszerű példával.

Vegyünk egy vonalzót és egy hajszálat; az a feladat, hogy meghatározzuk a hajszál vastagságát. Minden rendelkezésünkre áll: tárgy, eszköz, ember, mégis bajban vagyunk, mert legfeljebb azt a választ tudjuk adni, hogy a hajszál sokkal vékonyabb, mint egy milliméter. De ha veszünk egy mikrométert, akkor azonnal meg tudjuk adni a pontosabb eredményt: a hajszál vastagsága 50 mikron. Mire szeretnék ezzel a példával rávilágítani? Arra, hogy a méréshez olyan vonalzót kell használni, amelynek beosztása, skálája megegyezik a mérendő távolsággal vagy finomabb nála. Felmerül a kérdés: milyen vonalzót használjunk az atomok közötti távolság mérésére? Tudjuk, hogy az atomok közötti távolság kicsi, de milyen kicsi?

Az atomok közötti távolság a mikronnak (amely éppen látásunk határán van) a tízezred része. Ezt nevezzük angströmnek. Tehát az atomok néhány **angström** távolságban vannak egymástól. Mi az a vonalzó, amelynek ilyen finom a beosztása? Ennek megválaszolásához ejtsünk pár szót a hullámokról. A fizikában ugyanis gyakran használunk hullámokat vonalzóként.



Röntgen, Wilhelm Conrad
(1845–1923)

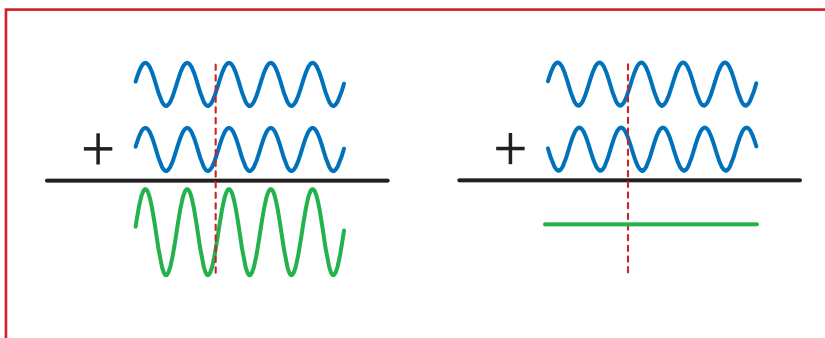


1. ábra. A hullám mint vonalzó

Miért alkalmas a **hullám** vonalzónak? Ha minden hullámhegy tetejéhez egy kis rovátkát teszünk (1. ábra), akkor egy egyenes vonalzót kapunk, melynek beosztásai **hullámhossz** távolságra vannak. Ezzel a hullámhosszal vetjük össze a mérendő távolságot. Persze ez nem mindig megy csak úgy ránézésre, mint egy egyszerű vonalzó esetén, hiszen gyakran a hullámot nem is látjuk. Az összehasonlításhoz a hullámok két fontos tulajdonságát használjuk: az objektumokról való visszaverődését, amit szakszóval *szórásnak* nevezünk, és a hullámok *összeadhatóságát*.

A mérés elve

Ha két hullám együtt fut – hullámhegy a hullámhegygel találkozik –, akkor az összegük egy kétszer akkora nagyságú hullám lesz. Ha azonban ellentétes **fázissal** – hullámhegy a hullám völgygel – találkoznak, akkor teljesen kioltják egymást (2. ábra bal oldal azonos fázisban, jobb oldal ellentétes fázis-

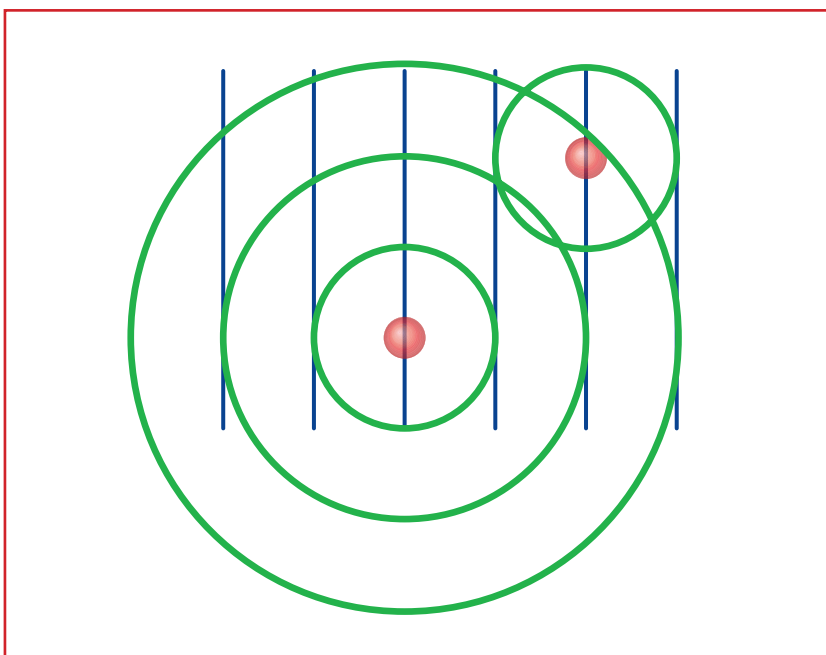


2. ábra. Hullámok összeadása

ban). Közbülső esetekben a két végét közötti hullámokat kapunk. Röviden ezt úgy mondjuk, hogy a hullámok összege attól függ, hogy egymáshoz képest milyen fázisban találkoznak. Lássuk tehát, hogyan használjuk a szórást és a hullámösszeadást a távolság méréséhez.

Válasszuk a legegyszerűbb rendszert, két objektumot, amelyekre beesik egy hullám. Ezek az objektumok a hullámnak egy részét szórják, általában a tér minden irányában (azt mondjuk, egy gömbhullámot bocsátanak ki). Ennek egy síkbeli vetületét mutatja a 3. ábra. Ez azonban így túl bonyolult, még nem látunk semmilyen törvényszerűséget. Ahhoz, hogy pontosabb képet kapjunk, vizsgáljuk csak azt, hogy mi történik egy adott irányban.

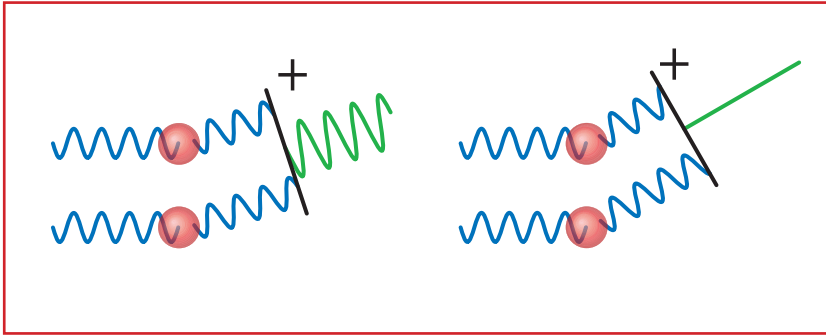
3. ábra. Hullám szóródása két testen



Ebben az irányban a két hullám éppen azonos fázissal találkozik, tehát egy nagy – kétegyeségnyi amplitúdójú – hullámot kapunk (4. ábra bal oldal). Ha azonban változtatjuk az irányt, a két szórt hullám relatív fázisa változik (4. ábra jobb oldal), és így a hullámösszeadásnál tanultaknak megfelelően az eredő hullám amplitúdója is változik.

Hasonlóan változik a relatív fázis, ha a szöget rögzítjük, és az objektumok távolságát változtatjuk.

Végül rögzíthetjük a szöget és a távolságot is, és csak a mérőhullám hul-



4. ábra. Szóródás két objektumról ha a távolság vagy a hullámhossz változik

lámhosszát változtatjuk – ez is a két szórt hullám fázisai közötti különbségre vezet, ami az eredő hullám nagyságának megváltozását eredményezi.

Azt hiszem, a fentiekből már számítások nélkül is világos, hogy a szórásképe, vagyis a térbeli intenzitáseloszlás függ az atomok távolságától. Egyszerű geometriai megfontolások alapján megmutatható, hogy a nagy, illetve a kis intenzitású irányok ismeretében visszakövetkeztethetünk az objektumok távolságára.

Most már tudjuk, hogyan lehet összehasonlítani a hullámhosszal a mérhető távolságot: térbeli intenzitáseloszlást kell mérnünk. A következő kérdés: milyen hullámot használjunk? A fény mint elektromágneses hullám nagyon jó lenne, hiszen látjuk és könnyű előállítani. A fény körülbelül 0,5 mikron hullámhossza azonban az atomokat tekintve olyan, mintha hajszálakat akarnánk mérni centiméteres beosztású vonalzóval, tehát nem megfelelő. Szerencsére elektromágneses hullámokat sokkal rövidebb, például angström hullámhosszúsággal is elő tudunk állítani, ami a tipikus atomi távolság. Ezeket a rövid hullámhosszú elektromágneses hullámokat nevezzük röntgensugárzásnak. Tehát ez lesz a vonalzó.



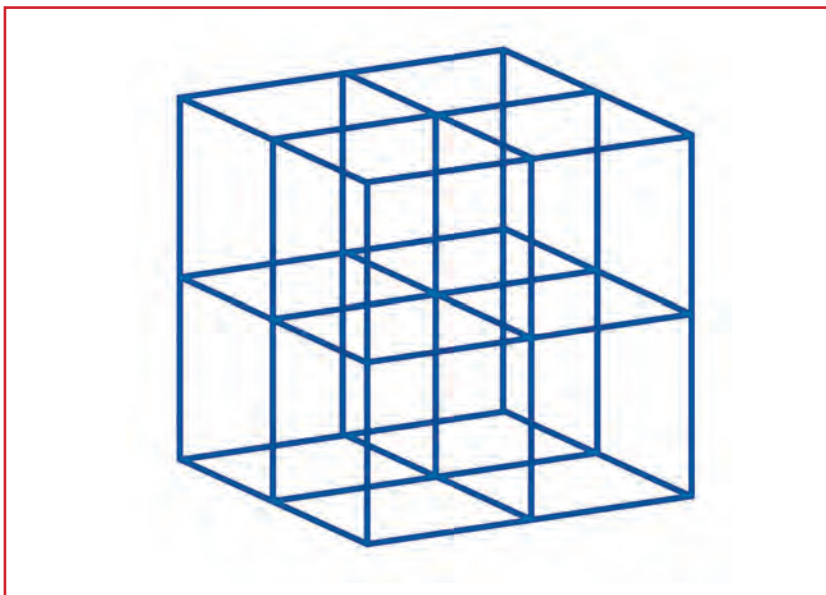
Ångström, Anders Jonas (1814–1874)

A minta

Természetesen a figyelmes hallgató felvetheti, hogy a valódi rendszerekben nem két atom van, hanem sok. Ez kétségkívül nehezíti a megoldást, de azt hiszem, el tudjuk képzelni, hogy ha háromra, négyre stb. növeljük az atomok számát, a szórásképe változik, és ebből vissza tudjuk kapni az atomok térbeli elhelyezkedését. Az is nyilvánvaló, hogy ha növeljük az atomok számát, egyre nehezebb és bonyolultabb lesz ez a feladat. Egy kézzelfogható anyagdarab esetén az abban található atomok száma 10^{23} . Ez nagyon nagy szám! Az, hogy ennyi atom által szórt ugyanennyi hullám összegéből valamit is meg tudunk határozni, már eléggé valószínűtlennek tűnik. Valójában ez így is van: általánosságban egy kicsi, de látható anyagdarab összes atomjának pontos helyét nem tudjuk megadni. Ennek – még ha elvileg meg is tudnánk határozni – a gyakorlatban olyan egyszerű akadálya van, hogy ennyi adatot (minden atomhoz négy szám tartozik: három jelöli a térbeli helyét, egy pedig azt, hogy milyen fajta atom), tehát 4×10^{23} számot, a világ összes számítógépes tárolókapacitása sem lenne képes befogadni.



5. ábra. Kockarács

**Elemi cella:**

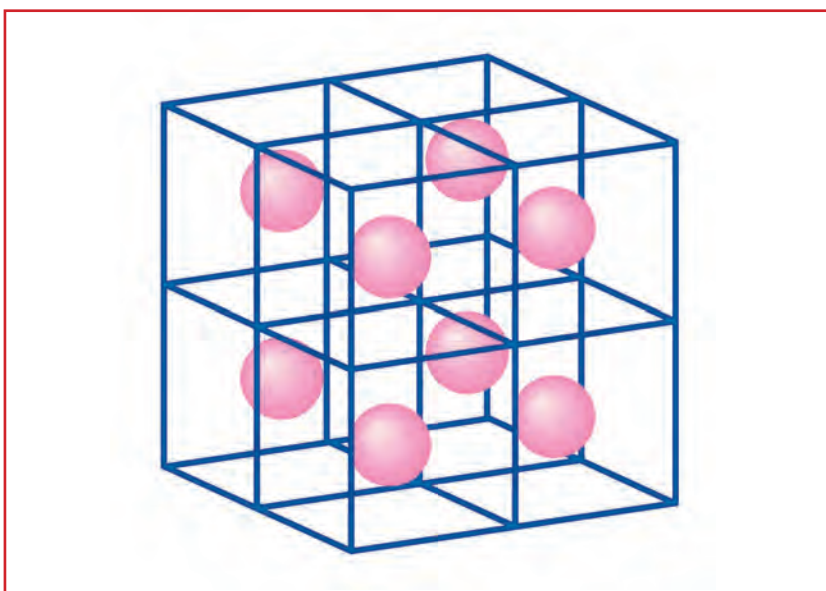
az a kis térfogatelem, amelynek szoros, térkitöltő egymás mellé rakásával kapjuk a kristályokat. Különböző anyagoknak különböző alakú elemi cellája lehet.

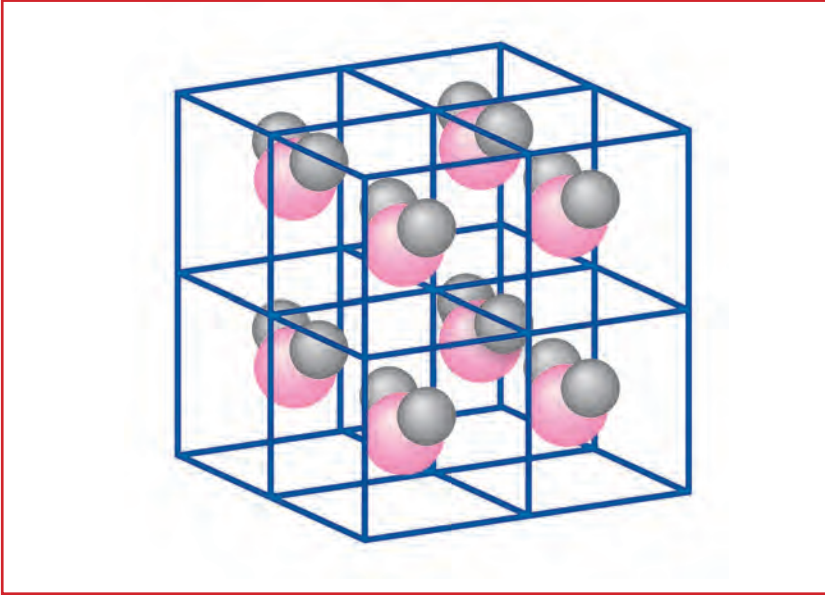
Kristály:

azokat az anyagokat nevezzük kristálynak, amelyek felépíthetők azonos kis térfogategységek, elemi cellák szoros egymás mellé pakolásával.

A helyzet azért nem ennyire reménytelen, mert a természet a segítségünkre siet. Az anyagok egy nagy csoportjában az atomok nem összevissza, hanem szép rendben helyezkednek el. Miért segít ez nekünk? Ennek megértéséhez vizsgáljuk meg, milyen is ez a rend. Kiderül, hogy nagyon sok anyagunkat felépíthetjük úgy, hogy azonos kis térfogatelemeket (tudományosan **elemi cellákat**) rakunk szorosan egymás mellé. Az azonos itt azt jelenti, hogy nemcsak az alakjuk azonos, hanem mindegyikben pontosan ugyanúgy helyezkednek el az atomok is. Az ilyen felépítésű anyagokat **kristályoknak** nevezzük. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy ezek a cellák kis kockák. Ebben az esetben az 5. ábrán látható kockarácsot kapjuk, és ezt természetesen folytathatjuk a végtelenségig, itt csak a rács egy kis darabját rajzoltuk fel. Ugye milyen unalmas a kristályos anyag? Csupa ismétlés. No de menjünk tovább, hiszen ez még csak a rács. Hátha kidíszíthetjük valahogy ezt az egyhangú rácsot.

6. ábra. Atomok a rácsban





7. ábra. Molekulák a rácsban

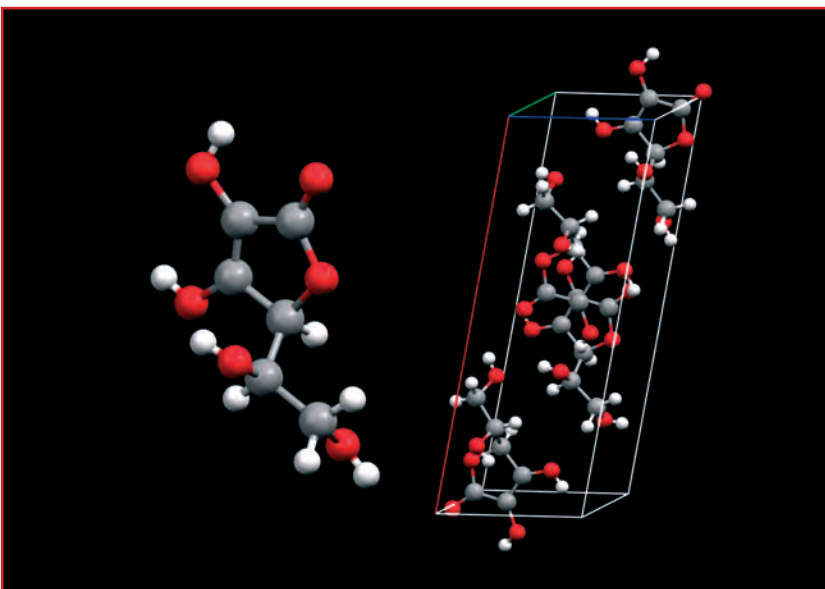
A legegyszerűbb szerkezet akkor adódik, ha a cellák közepébe egyetlen atomot helyezünk (6. ábra).

De tehetünk ide egy több atomból álló molekulát is, mint amilyen például a víz (7. ábra).

Ez még mindig nem túl változatos. A természet sok tekintetben ettől többet tud, a cella leggyakrabban nem ilyen egyszerű kockarács, hanem olyan rács, amelynek oldalai különböző hosszúak, és a szögei is gyakran eltérnek a 90 foktól. Az illusztráció kedvéért bemutatom a mindenki által jól ismert C-vitamin molekuláját és kristálya elemi celláját (8. ábra).

Ugye ez már nem olyan unalmas?

Térjünk vissza az eredeti problémához: miért előnyös számunkra egy ilyen rend? Azért, mert ebben az esetben elég megadni annak a néhány atomnak a helyét, ami egyetlen elemi cellában található. A többi atom he-



8. ábra. C-vitamin-molekula és elemi cella



lyét már számítással megkaphatjuk, hiszen csak hozzá kell adni az első elemi cellában lévő atomok koordinátáihoz a cellaéllyi eltolásokat. Tehát egyéllyi eltolással megkapjuk a legközelebbi szomszédokat, további eltolásokkal pedig az egész rácsot.

Részletes megfontolások – és természetesen mérések – azt mutatják, hogy az előbb bemutatott kristályos rend tükröződik a szórásképben is. Az ilyen anyagok szórásképe is egy rácsot alkot, tehát a nagy intenzitású irányok úgy helyezkednek el, mint egy rács pontjaihoz húzott egyenesek közötti irányok.

Az így kapott rács szoros kapcsolatban van az atomi ráccsal. Ez az egyszerűsítés, tehát az anyagok nagy részének kristályos volta teszi lehetővé az atomi szerkezet meghatározását. Most, hogy a szerkezetmeghatározás elvi alapjait lefektettük, a gyakorlati megvalósítás felé fordulnánk.

Röntgenforrások

Röntgenforrás:

olyan berendezés, amely segítségével röntgensugárzást tudunk kelteni. Leggyakoribb fajtája a hagyományos röntgen-generátor, melyben röntgenső segítségével keltjük a sugárzást. Egyik fajtáját a szinkrotronok képezik, melyeket tudományos kutatásra használnak.

Röntgenső:

általában olyan üveg- vagy kerámiacső, melyben a vákuumban levő két elektróda közötti nagyfeszültség hatására elektronok gyorsulnak a pozitív elektróda felé, és abba ütközve röntgensugárzást keltenek.

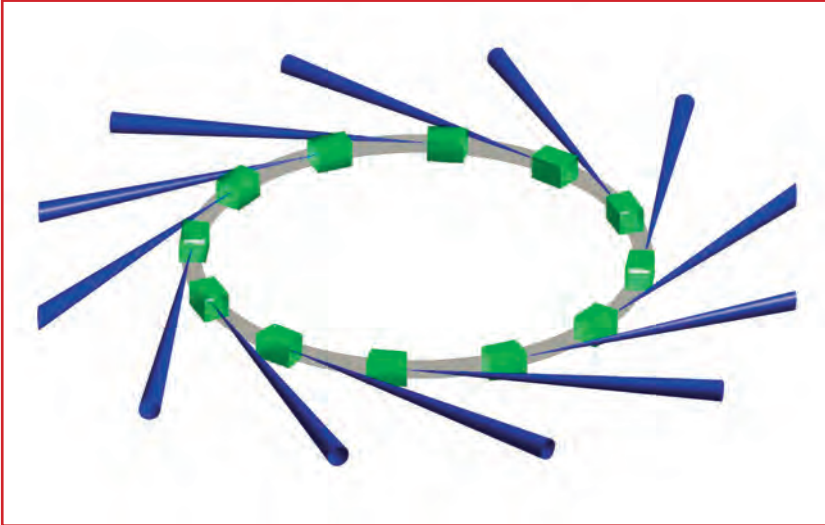
Szinkrotron:

olyan röntgenforrás, amelyben az elektronok majdnem fénysebességgel, zárt, közel körpályán keringenek és gyorsulásuk következtében elektromágneses sugárzást bocsátanak ki. Méretük a méteres átméretől a kilométeresig terjed.

A **röntgenforrás** minősége döntően befolyásolja, hogy milyen bonyolultságú szerkezetet tudunk meghatározni. Egy hasonlattal szeretném ezt megvilágítani. Ha egy hangulatos vacsoránál ülünk, a gyertyafény is elegendő, hogy szájunkhoz emeljük a kanalat vagy megtaláljuk poharunkat. Ugyanakkor, ha egy tűbe szeretnénk befűzni a cernát, egy sokkal jobb fényforrásra van szükségünk, és ha egy mikroszkópon vizsgálunk egy kis tárgyat, akkor még erősebb, még jobban irányított fényforrást kell használnunk. Tehát az, hogy mennyi és milyen részletességű információt szerzünk a látás segítségével, nagymértékben függ a *fényforrás minőségétől*. Ugyanígy van ez a röntgensugárzás esetén is, sőt talán még egy kicsit nagyobbak is a különbségek az egyes források között, mint az előző példában. A röntgenforrások kiemelt szerepe miatt bővebben szeretnék beszélni róluk. Három forrást fogok bemutatni: a hagyományos röntgenforrást, a szinkrotronokat és a röntgen szabadelektron lézert.

A *hagyományos röntgenforrás* lelke a **röntgenső**. Működése két folyamaton alapul: az első, hogy a gyorsuló töltések elektromágneses hullámokat sugároznak. A második, hogy a nagy energiájú elektronok az atomi elektronokat kiüthetik helyükről, és az így gerjesztett atom fölös energiáját egy röntgenfoton kibocsátásával adja le. Ezt a két folyamatot a röntgensőben úgy érjük el, hogy két fémelektróda közé nagyfeszültséget kapcsolunk, és a negatív elektródán elektronokat keltünk. Ezek a pozitív elektróda, az anód felé közeledve egyre nagyobb sebességre tesznek szert, majd becsapódnak, és így hirtelen lefékeződnek. Az elektronok becsapódásakor történik az említett két folyamat, és így ezek a csövek röntgensugárzást bocsátanak ki a tér minden irányába.

Egy ettől nagyobb teljesítményű, modernebb forrás a **szinkrotron** sugárforrás. Ebben is gyorsuló töltések keltik a röntgensugárzást, itt azonban nem egy kis üvegcsőben az anódba ütköznek az elektronok, hanem egy hatalmas gyűrűben közel a fény sebességével keringenek. Mint ismeretes, a körpályán mozgó test gyorsul. Ezért ezek az elektronok is sugároznak.



9. ábra. Szinkrotron vázlata

Pontos számítások azt mutatják, hogy a sugárzás a 9. ábrán jelölt módon, tehát majdnem párhuzamos nyaláb formájában történik, és igen nagy intenzitással. Így ezek a sugárforrások lehetővé teszik számos olyan probléma megoldását, amelyekhez hagyományos röntgenforrásokkal nem is érdemes hozzákezdeni. Leglátványosabbak talán az élő szervezetekkel kapcsolatos eredmények. Sok tízezer fehérje, sőt még vírusok szerkezetét is sikerült meghatározni. Egy kristályosított vírus elemi cellájában több százezer atom található.

Térjünk vissza a szinkrotronokhoz. Mivel ezek hatása sok tudományágra kiterjed, s igen széleskörű – a biológián, fizikán, kémián, orvostudományon keresztül egészen a régészetig –, nem árt még néhány jellegzetességet elmondani róluk. Egy ilyen, néha kilométeres nagyságot elérő gyűrű (10. ábra) köré sok (akár közel száz) különböző mérésekre alkalmas állomást telepítenek, ezek éjjel-nappal üzemelnek. A sugárzás nem folytonosan, ha-

10. ábra. Európai Szinkrotron
(Forrás: ESRF)


Fullerénmolekulák:

zárt héjszerűen elhelyezkedő szénatomokból felépülő molekulák; felfedezésükért 1996-ban Nobel-díjat adtak.

C₆₀-molekula:

héjszerűen elhelyezkedő hatvan szénatomból felépülő molekula, mely a fullerénmolekulák családjába tartozik. A molekulában az atomok elhelyezkedése megfelel egy futball-labda mintázatának.

nem nagyon rövid (10^{-10} sec, 100 ps, azaz a másodperc milliomodrészének tízezred része hosszúságú) impulzusokban érkezik a mintára. Ennek oka, hogy az elektronok nem folytonosan, hanem kis csomagokban haladnak a gyűrűben.

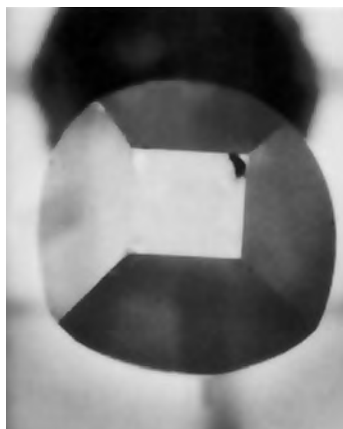
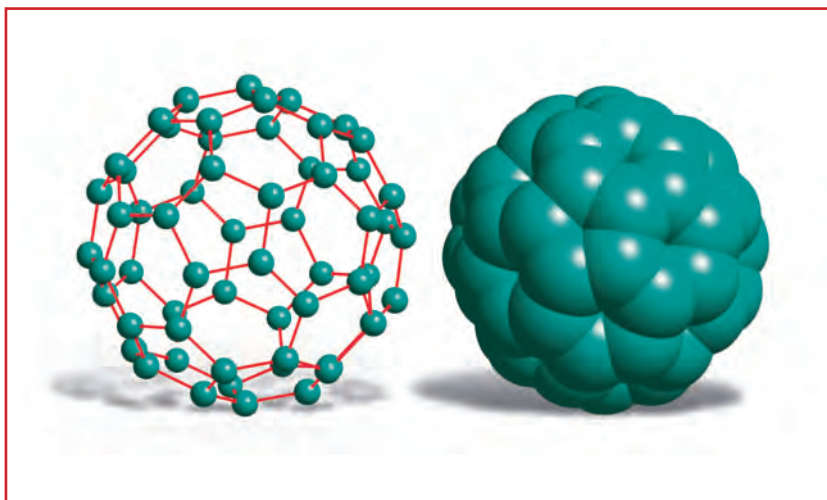
Amikor a részecskék az ablakhoz érnek, egy villanást látunk. Ez az impulzusjelleg lehetőséget nyújt különböző folyamatok időbeli lefutásának vizsgálatára. Például megtudhatjuk, hogy milyen lépéseken keresztül kapcsolódik be az oxigén a hemoglobinba, vagy hogyan történik az olvadás, és még sok értékes információt nyerhetünk az anyagokban lezajló folyamatokról.

A harmadik típusú forrásról, a röntgen szabadelektron lézerről a későbbiekben lesz szó, mivel ez a jövőbeli fejlesztésekhez kapcsolódik.

Eddig általánosságban beszéltem a szerkezetkutatásról. A következőkben szeretnék néhány szót szólni arról, mit is csinálunk mi a Szilárdtest Fizikai Kutatóintézet röntgendiffrakciós csoportjában. A sokféle tevékenységből két dolgot emelnék ki: az egyik egy néhány évvel ezelőtti eredményünk, a másik pedig egy olyan kutatás, ami a jövőbe mutat.

Talán ismert a hallgatóság számára, hogy egy picit több mint tíz éve fedezték fel a szén egy új módosulatát, a zárt héjszerű **fullerénmolekulákból** felépülő anyagokat. Ezért a felfedezésért néhány éve adtak Nobel-díjat. Az elmúlt években sokat foglalkoztunk olyan anyagokkal, amelyek fullerénmolekulákat tartalmaznak. A legismertebb fullerénmolekula a focilabda alakú C₆₀. Ezt a molekulát láthatjuk a 11.a ábrán.

11. a ábra. C₆₀-molekula

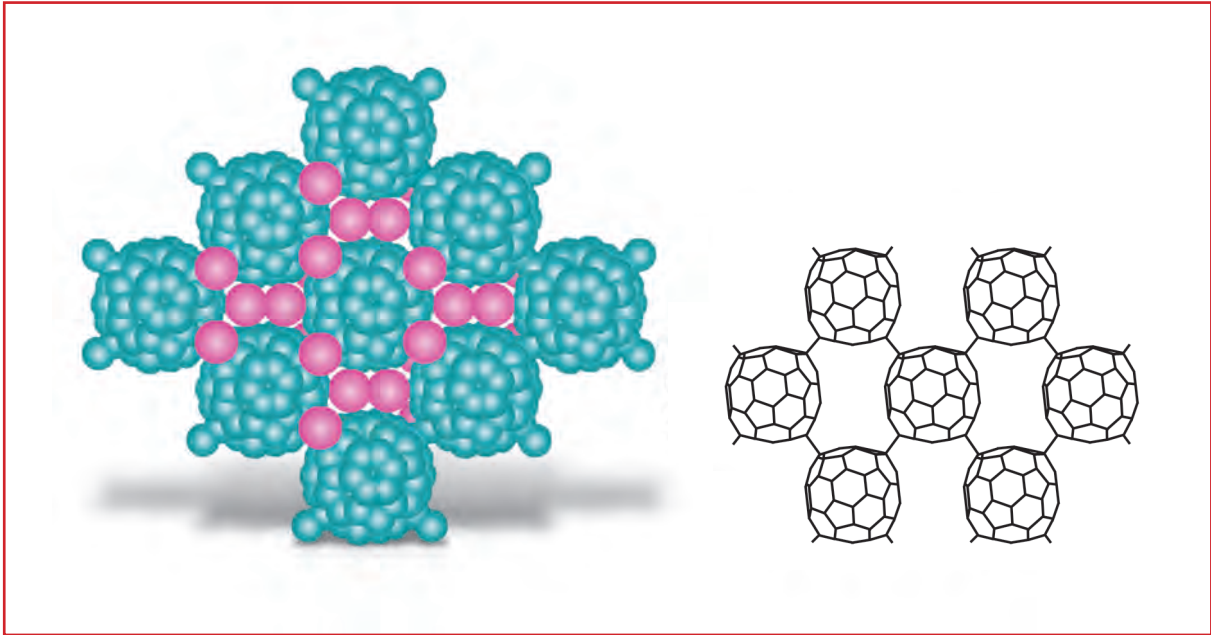


11. b ábra. A kristályos C₆₀ fényképe

A C₆₀ szilárd fázisa, melynek elemi cellája felülcentrált köbös – tehát egyszerű –, de egyszerűségében is érdekes tulajdonságokkal rendelkezik.

Például, ki gondolná, hogy egy kézzelfogható szép kristályos anyagban, mint amilyen a kristályosodott C₆₀ (11.b ábra), a molekulák hatalmas sebességgel véletlenszerűen minden irányban forognak.

Még ennél is érdekesebbek a C₆₀ vegyületei. Kutatócsoportunk többek között a C₆₀ alkálifémekkel alkotott vegyületeivel is foglalkozott. Ezek közül többnek a szerkezetét mi határoztuk meg elsőként. A 12. ábrán a Na₄C₆₀-ban található atomi rendet mutatom.



Ennek az anyagnak az érdekessége, hogy a C_{60} -molekulák egy-egy síkban erős kovalens kötéssel kapcsolódnak, és így egy kétdimenziós kristályos polimert alakítanak ki. Megjegyzem, hogy e szerkezetet csak nagyon pontos, szinkrotron mellett végzett mérések segítségével tudtuk meghatározni.

12. ábra. Atomok elhelyezkedése a Na_4C_{60} vegyületben

Problémák és jövőbeli megoldások

A következőkben arról szólnék röviden, milyen lesz a jövő szerkezetkutatása. Itt elsősorban a röntgen szerkezetkutatásra koncentrálok, bár természetesen más módszerek is fontos szerepet fognak játszani. Tehát mik jelenleg a röntgen szerkezetkutatás legnagyobb problémái?

Három lényeges problémát említek.

Az első egy elvi probléma, melynek lényege, hogy méréskor detektorainkkal csak a beeső fotonok darabszámát tudjuk meghatározni, azt azonban nem, hogy egymáshoz képest ezek milyen fázisban érkeznek. Egy hullám teljes jellemzéséhez pedig ez az információ is hozzátartozik. Ez az információhiány lényegesen nehezíti a térbeli szerkezet meghatározását. A probléma részleges megoldására számos módszer létezik. Lényegük, hogy a hiányzó fázisinformációt valamilyen más, a mintán mérhető adatsorral próbálják pótolni. A probléma direkt megoldását jelentené a *röntgenholografikus módszerek* használata, melyek esetén a mért intenzitásértékekben a fázisinformáció is kódolva van. E módszerek technikai fejlettségi szintje azonban még nem teszi lehetővé széles körű alkalmazásukat.

A másik két probléma gyakorlati jellegű: az egyik, amit korábban már említettem, hogy *kristályra* van szükségünk a méréshez, a másik pedig a *su-*



gárcárosodás. Mivel az első szükségességéről már beszéltem, most erre nem térek ki. A sugárcárosodást a tárgyalás egyszerűsítése kedvéért korábban kihagytam. Most néhány szót szólnék róla, és megmutatom, hogy a két említett probléma, tehát a kristály szükségessége és a sugárcárosodás erősen összefügg.

A mintára eső röntgensugárzás nemcsak olyan szórásfolyamatban vehet részt, amikor a hullám nem veszít energiát a szórás folyamán (ez szaknyelven *rugalmas szórásnak* nevezzük), hanem olyan folyamatban is, amikor az atomoknak energiát ad át. Ezek a *rugalmatlan szórások*. Ilyenkor azonban az anyagnak átadott energia roncsolja a mintát, az atomok kimozdulhatnak helyükről, kémiai kötések szakadhatnak fel. Ez azt jelenti, hogy mérés közben megváltozik a minta, tehát annak eredeti szerkezetét nem tudjuk meghatározni. De a minta kristályos volta itt ismét segítségünkre van, ugyanis a sugárzás a minta legkülönbözőbb helyein, tehát más és más elemi cellában véletlenszerűen más és más atomot mozdit el. Továbbá az egész mérés alatt csak az elemi cellák egy kis részében keletkezik hiba. A mérés a sok elemi cella átlagát látja, ez pedig a véletlenszerű hibakeltés miatt megegyezik a cellában található eredeti atomi elrendeződéssel.

De mit tegyünk akkor, ha a vizsgálni kívánt egyedi részecskék – egy molekula, egy fématomokból álló atomfűrt vagy éppen egy vírus – nem akarnak szép sorba rendeződni, tehát nem tudunk kristályt növesztetni? Ha csak egyetlenegy részecskénk van, akkor nyilvánvaló, hogy a legkisebb sugárcárosodás is torzítja a mérés eredményét. Sajnos a rugalmatlan szórás valószínűségét nem tudjuk lényegesen befolyásolni, tehát sugárcárosodás mindig van. Úgy tűnik, itt megakadtunk, egy kicsi egyedi részecske atomi szintű szerkezetét nem tudjuk meghatározni. De a kutatók nem adják fel egykönnyen. A következőkben egy magyar származású, jelenleg Uppsalában dolgozó kollégánk, Hajdú János ötletét mutatom be, akivel együtt dolgozunk. Ez az ötlet egy kis reményt nyújt egyedi részecskék szerkezetének meghatározására. Az ötlet megértéséhez vizsgáljuk meg, hogyan történik a sugárcárosodási folyamat. Ez olyan, mint a csillagok háborúja. A méréshez használt röntgenhullámok úgy érkeznek, mint a támadók lövedékei.

Némelyik rugalmasan szóródik, mások pedig rugalmatlanul, vagyis kiütnek egy-egy elektront. Így az atomok egy része ionizálódik: pozitív töltésű lesz. Ezek a pozitív töltések taszítják egymást, és ezért egyre gyorsulva elmozdulnak helyükről. A minta szétrobban. Ezért nem tudjuk meghatározni a szerkezetet. Hajdú Jánosnak támadt az az ötlete, hogy olyan gyorsan kell lemérnünk a szerkezetet, hogy az atomoknak ne legyen idejük elmozdulni. Ez igen egyszerűen hangzik, ha azonban megbecsüljük, hogy milyen rövid ez az idő, azt kapjuk, hogy 10^{-15} másodperc, azaz a másodperc milliárdodrésze a milliomodrésze. Ez azt jelenti, hogy ilyen rövid röntgenimpulzusokkal kellene mérni, és az adatokat ilyen gyorsan begyűjteni. Jelenleg semmilyen mód nincs ilyen gyors mérésre, hiszen ha visszaemlékszünk a szinkrotronok impulzusaira, ezek hossza – 10^{-10} másodperc – ugyan nagyon rövid, de még így is százezerszer hosz-

Szabadelektron lézer:

a napjainkban épülő legújabb röntgenforrások. Ezekben egyenes pályán elektronokat gyorsítunk fénysebességre, és ezeket átvezetjük egy periodikus mágneses téren. Ebben a térben az elektronok hullámmozgást végeznek, és ennek során a gyorsulásuk következtében röntgensugárzást bocsátanak ki, amely rendelkezik a lézerekre jellemző koherenciával és monokromaticitással.

Femtosecundum (fs):

időmértékegység, $1 \text{ fs} = 10^{-15}$ másodperc.

Plazma:

töltött szabad részecskékből felépülő, eredően semleges „gáz”.



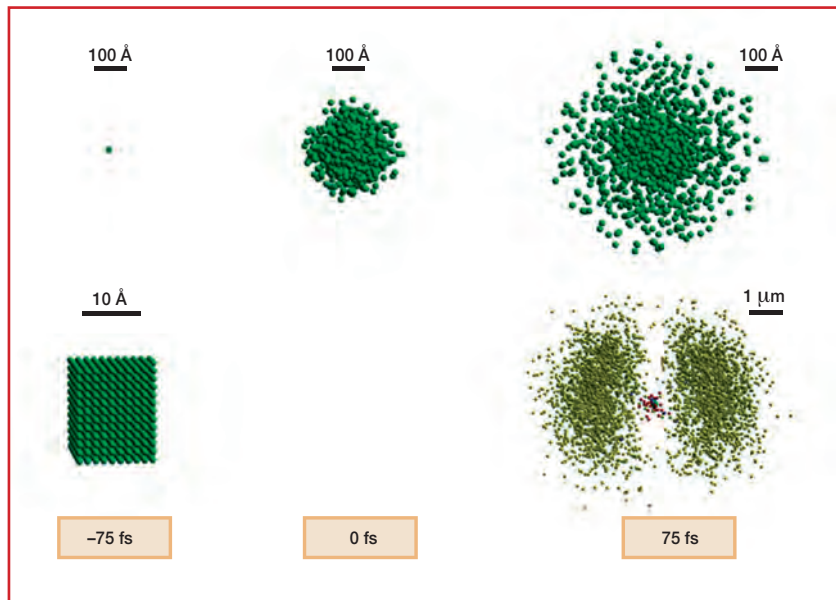
13. ábra. A stanfordi 50 GeV-os lineáris gyorsító. Erre a ma már meglévő lineáris gyorsítóra alapozva épül az első szabadelektron röntgenlézer

szabb, mint kellene. Ennek ellenére a fenti ötlet nem légből kapott. Azokon az úgynevezett *negyedik generációs röntgenforrásokon* alapul, amelyeket napjainkban kezdenek építeni: az elsőt 2008-ban Stanfordban (13. ábra), a másodikat pedig 2012-ben Hamburgban helyezik majd üzembe.

A negyedik generációs sugárforrások röntgenlézerek, pontosan fogalmazva röntgen **szabadelektron lézerek**. Ezek több kilométer vagy inkább több tíz kilométer hosszú lineáris elektrongyorsítók, amelyeknek a végén egy olyan egység van, ami az elektronokat hullámmozgásra készíti, így ezek gyorsulnak, és ennek megfelelően sugároznak.

A rendszer paramétereinek megfelelő megválasztásával érhető el, hogy a lézerhatás fellépjen, és a kijövő sugárzás igen intenzív, koherens és párhuzamos nyaláb legyen. Ezek az eszközök vagy továbbfejlesztett változataik már megfelelő röntgenimpulzusokat fognak szolgáltatni a javasolt méréshez. Jelenleg kutatócsoportunk többek között az egyedi részecskék leképzésekor felmerülő problémák megoldásával foglalkozik. Ezek közül a legalapvetőbb a minta robbanási folyamatának leírása, hiszen ez szabja meg, mennyi időnk van az eredeti szerkezet mérésére.

A 14. ábra egy 1500 atomot tartalmazó kis részecske szabadelektron lézer röntgenimpulzusának hatására bekövetkező robbanását mutatja. Az impulzus hossza 10 **femtosecundum** (fs). Az impulzus hatására leszakított elektronok – a sárga gömbök – nagy sebességgel mozognak, és rövid idő alatt távoznak, és így a visszamaradó pozitív ionok – zöld gömbök – taszítják egymást, és a minta elveszti eredeti atomi rendjét, szétrobban. A piros és kék gömbök a másodlagosan leszakított kisebb energiájú elektronokat jelképezik, amelyek nem tudnak megszökni, és az ionokkal egy kis **plazma**-gömböcskét alakítanak ki. A modellezésből nyilvánvaló, hogy csak az impulzus elején, az első néhány femtosecundumban mérhetünk. Ebben az időszakban még közelítőleg az eredeti atomi rendet látjuk. Ezek az eredmények ösztökélik arra a szabadelektronlézer-tervezőket, hogy még rövidebb



14. ábra. Az 1500 atomos részecske robbanása

impulzushosszal rendelkező forrásokat építsenek. Az, hogy ez sikerül-e, és ha igen, akkor a gyakorlatban is meg tudjuk-e határozni egyedi részecskék atomi szerkezetét, a jövő titka.

Végül a következőkkel szeretném zárni az előadást: az anyag atomi szerkezetének gondolata egészen az ókorig nyúlik vissza. Az emberi kíváncsiság, a természet megértésére való kitartó törekvés azonban csak a múlt században vezetett el a valódi atomi rend megismeréséhez. A természet működésének megismerése, az új ismeretek szerzése iránti igény az emberekben ösztönös. Ma úgy nevezzük ezt, hogy alapkutatás. Ennek célja minőségileg új ismeretek szerzése, a természet működésének megértése. Ez a megértés az emberi szabadság záloga is. Hiszen akkor tudunk optimálisan cselekedni, a természet erőit saját javunkra fordítani, és akkor nem vezetnek minket az orrunknál fogva, ha értjük a körülöttünk lévő világ működését.

Ajánlott irodalom

- Braun Tibor*: A káprázatos C_{60} molekula. Bp.: Akadémiai K., 1996.
- Brümmer, Otto – Heydenreich, Johannes – Krebs, Karl Heinz*: Szilárd testek vizsgálata elektronokkal, ionokkal és röntgensugárással. Bp.: Műszaki Kvk., 1984.
- Faigel Gyula*: Fullerének. *Fizikai Szemle*, 9. sz. (1994): 349–351.
- Faigel Gyula*: A röntgensugárzás hatása hétköznapjainkra. *Fizikai Szemle*, 11. sz. (2004): 362–367.
- Faigel Gyula*: Röntgensugárzás az anyagszerkezet vizsgálatban. *Magyar Tudomány*, 9. sz. (1995): 1063–1074.
- Jurek, Zoltán – Faigel, Gyula – Tégze, Miklós*: Dynamics in a cluster under the influence of intense femtosecond hard x-ray pulses. *European Physical Journal D*, Vol. 29 (2004): 217.
- Jurek, Zoltán – Oszlányi, Gábor – Faigel, Gyula*: Imaging atom-clusters by hard x-ray free electron lasers. *Europhysics Letters*, Vol. 65 (2004): 491–497.
- Koch, Ernst-Eckhard*: Handbook on Synchrotron Radiation. Amsterdam: North Holland Publishing Company, 1983.
- Oszlányi, Gábor – Baumgartner, Gabriel – Faigel, Gyula – Forró, László*: Na_4C_{60} : An alkali Intercalated Two-dimensional Polymer. *Physical Review Letters*, Vol. 78 (1997): 4438–4441.
- Oszlányi, Gábor – Baumgartner, Gabriel – Faigel, Gyula – Gránásy, László – Forró, László*: Polymer-monomer phase transition in Na_4C_{60} . *Physical Review*, Vol. B58 (1998): 5–7.
- Stephens, Peter Wesley – Bortel, Gábor – Faigel, Gyula – Tégze, Miklós – Jánossy, András – Pekker, Sándor – Oszlányi, Gábor – Forró, László*: Polymer chains in Rb_1C_{60} and K_1C_{60} . *Nature*, Vol. 370 (1994): 636–637.

