

Braun Tibor

■ ELTE Kémiai Intézet

A kristályos szén-nanotudomány legújabb kori diadalútja

Interdiszciplináris fullerén-, nanocső- és grafénkutatási eszkaláció

Arra a kérdésre, hogy a huszadik század végén, illetve a huszonegyedik század elején a periódusos rendszer elemei közül melyiknél lett volna várható jelentős, látványos fejlődés a kémiai tudományos kutatásban, kevesen említették volna a tulajdonságaiban sokoldalúan kiismert és megismert, karakterében és tapintható valóságában szürke-fekete szén, a grafitot.

A szénkémia káprázatos, legújabb kori megújulása 1985-ben vette kezdetét, amikor Kroto, Curl és Smalley [1] felfedezték a fullerének grafitplazma generálta tömegspektrometriai létét. 1990-ben, következő lépésként, Krätschmer, Huffman és doktoranduszai [2] bebizonyították, hogy a fullerének a kristályos szén új allotrópjai, amit alig egy évre rá, 1991-ben a japán Iijima [3] ragyogó felismerése, a szénnanocsövek felfedezése követett. A tudományos kutatás következő csodájára már csak 2004-ig kellett várni, amikor az angol–oroszl Geim–Novoselov [4] szerzőpárnak sikerült berobbantania a tudományos köztudatba az átfogóan új tulajdonságokkal rendelkező grafént és grafént. Az alig 20 év alatt létrejött tematikus egymásutánosság és annak kortársi közelsége rendkívüli fontosságúnak tekintendő a tudományos kutatás jelentőségének bizonyítására. Nem könnyű magyarázatot találni arra, hogy aránylag rövid idő alatt hogyan jöhettek létre ezek a rendkívüli felfedezések, amelyeknek jelentőségét a világ nemzetközi tudományos közössége a legnagyobb elismeréssel kísérte.

Krotót, Curlyt és Smalley-t 1996-ban kémiai Nobel-díjjal, Iijimát 2008-ban a Norvég Tudományos és Irodalmi Akadémia által odaítélt Kavli-díjjal [5], Krätschmert 2010-ben az Európai Község által létesített „European Inventor of the Year” díjjal [6], Geimet és Novoselovot 2010-ben fizikai Nobel-díjjal jutalmazták.

E sorok írója nem ismer a természettudományok történetében más koherens területet, amelyen ilyen rövid idő alatt az új felfedezések és az elismerések ilyen vagy hasonló koncentrációja figyelhető meg.

A továbbiakban három olyan tényezőre szeretnénk hangsúlyozottan rámutatni, amelyek hozzájárulhattak a széntudományokban bekövetkezett jelentős változásokhoz. Az első a terület kutatása során elért eredmények, ismeretek exponenciális növekedése, illetve azok növekedési sebessége, a második a grafitalapú széntudományok (fullerének, nanocsövek és grafén) területén publikáló szerzők számának növekedése, a harmadik a széntudományi kutatások interdiszciplináris jellege.

A legújabb kori széntudományi ismeretek (cikkek) számának növekedése

Annak ellenére, hogy a tudományos felfedezések létrejötte, folyamatainak és működési mechanizmusának megismerése bonyolult folyamat, Price munkássága óta ismert [7–8], hogy a kutatási eredmények akár tudományos cikkek, folyóiratok vagy például kutatók számának kumulatív növekedése révén jól követhetők.

A fullerénekkal, szénnanocsövekkel és a grafénnel foglalkozó folyóiratcikkeknek mint a tudományos információ hordozóinak növekedési ütemét, azaz a szakirodalom növekedését a szénkutatás mindenkorai színvonalra határozta meg. Minden új kutatási eredmény bizonyos mennyiségű, új kutatási munka elvégzésére sarkallt, mely során ezeket az eredményeket továbbfejlesztették, és/vagy megerősítették. Következésképpen a szénallotrópok szakirodalmának a cikkek $p(t)$ (p : publikációk száma) számában visszatükröződő növekedési ütemét a

$$\frac{dp}{dt} = kp$$

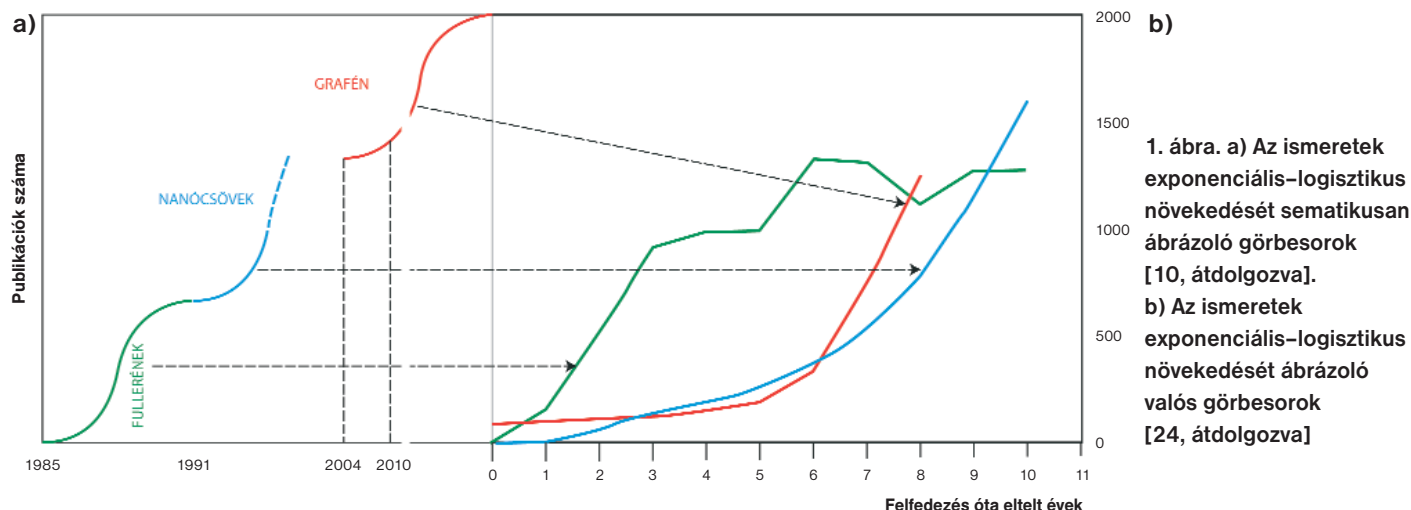
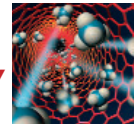
differentiálegyenlet írja le. Az egyenlet szerint a $\frac{dp}{dt}$ növekedési ütem a mindenkorai p -vel arányos, tehát az $\frac{1}{p} \frac{dp}{dt}$ relatív növeke-

dési ütem állandó. Az egyenletnek a $p(0) = p_0$ kezdeti feltételt kielégítő megoldása a

$$p(t) = p_0 e^{kt} \quad (k > 0)$$

exponenciális függvény.

Általában a növekedés csak addig maradt exponenciális, amíg a szakirodalom vagy széntudomány fejlődését megszabó külső körülményekben lényeges változások nem léptek fel. Ilyen változásnak, új fejleménynek tekinthető például a fullerénkutatásban a szénnanocsövek felfedezése. A fenti exponenciális relációval leírt növekedési folyamat a fullerének esetében nem tarthatott örökké: nehezen felderíthető vagy átlátható korlátozó tényezők, például kutatók áttérése a szénnanocsövek kutatásának területére, kötelező érvénnyel és fokozatosan éreztethették, illetve éreztetik hatásukat. Ebben az esetben a növekedés mechanizmusát pontosabban írja le a Pearl–Reed javasolta logisztikus függvény vagy a Gompertz-féle differentiálegyenlet.



Ilyenkor a relatív növekedési ütem már nem állandó, hanem p lineáris függvénye. Ez annyit jelent, hogy minél nagyobb a p szintje, annál kisebb a növekedés üteme (1.a ábra).

A növekedés egy másik modellje [9] alapján a fullerén-, nanocső- és grafén- (széntudományi) ismerethalmaz egy gömbhöz hasonlónak fogható fel, amely egy vékony felszíni réteg vagy kutatási front, az „epidermisz” mentén nő, azaz a legfrissebb kutatásokból leszűrt tudással együtt mozgó kutatási frontvonalak mentén halad egy n dimenziós térben, ahol a dimenziók a kutatási eredmények egymástól független növekedési irányainak felelnek meg. A modellt a

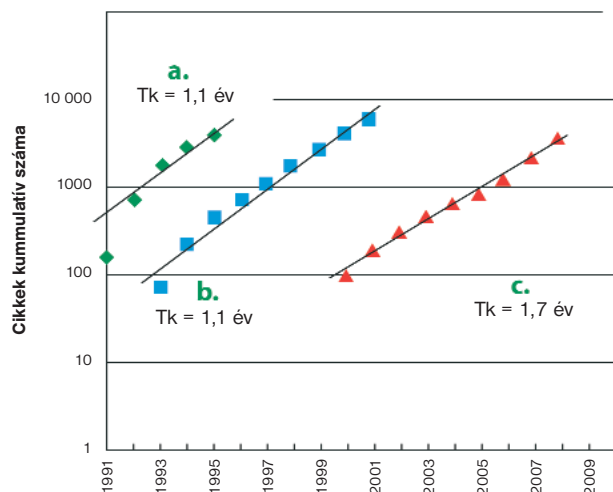
$$\frac{dQ}{dt} = CS(t)$$

differenciálegyenlet írja le, ahol $Q(t)$ a kutatási ismeretek terjedelme, $S(t)$ a t időpontban mért felület, C pedig valamilyen állandó. Az egyenlet megoldása

$$Q(t) = \beta t^n$$

alakú, β az arányossági tényező. Ez az egyenlet szintén exponenciális növekedést eredményez, ha n , a tudományos kutatás, mint a rendszer szabadsági fokainak száma, korlátlanul növekszik.

2. ábra. Az exponenciális növekedések sebessége (kétszereződési ideje) [24, átdolgozva]. a) A logisztikussá alakuló fullerénirodalom kezdeti (1991–1995) gyors szakasza. b) A szénnanocső-irodalom növekedési sebessége. c) A grafén-irodalom növekedési sebessége



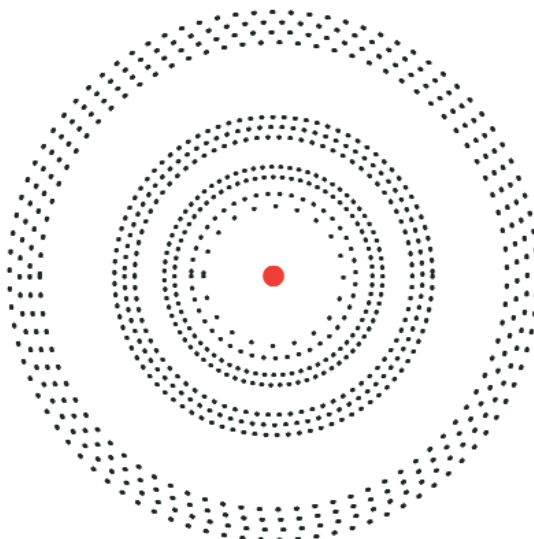
Az exponenciális görbe jól jellemezhető azzal az időtartammal, amely alatt p értéke a kétszereződésre nő (T_k : kétszereződési idő).

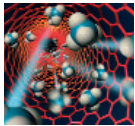
A fentebb vázoltakat tükrözi az 1.a ábrán már előzőleg [10] is részben bemutatott idealizált exponenciális, illetve logisztikus növekedési modell. A publikációk számának valós növekedését bemutató 1.b ábrán megfigyelhető a fullerénkutatási publikációk haladása a logisztikus növekedés felé, valamint a szénnanocsővek és a grafén kutatásának cikkekben megnyilvánuló, még napjainkban is tartó exponenciális növekedése.

A 2. ábrán jól láthatók az exponenciális növekedések kétszereződési idői (T_k), azaz azok az időtartamok, amelyek alatt a témában publikált ismeretek száma a duplájára növekedett. Ez persze a növekedések sebességét is jelzi, ugyanis minél rövidebb a kétszereződési idő, annál nagyobb a növekedés sebessége. A széntudomány területén az utóbbi év folyamán tapasztalt exponenciális növekedést létrehozó fejlődést kutatási *eszkálációnak* tekinthetjük.

A publikációk által jelzett exponenciális publikációnövekedéseket látványosan jelzi a cikkek idézettsége is, mint például a 3. ábrán bemutatott, a grafénlázttal kezelt cikk [4] idézettségének a terjedése. Az idézettség gyarapodását az ábra úgy mutatja be,

3. ábra. A Novoselov és Geim cikkét [4] (piros pont az ábra közepén) 2004 és 2009 között idéző cikkek (körkörös pontok) számának hullámszerű terjedése [13]





mint egy tóba dobott kő által létrehozott hullámok körkörös terjedését.

A szerzők számának növekedése

Nemrég kimutatták [11], hogy aránylag egyszerű összefüggés áll fenn a publikált folyóiratcikkek száma és a cikkeket publikáló szerzők száma között, azaz

$$\Delta \text{ cikkek} = C (\Delta \text{ szerzők száma})^\alpha$$

Itt Δ (egy éves időtartam alatt publikált) új cikkeket, C normalizálási állandót és α skálázási exponenst jelent.

Ennek megfelelően például az $\alpha > 1$ értékek azt jelzik, hogy a publikációk egy főre eső értéke, azaz a szerzők cikkproduktivitása olyan mértékben növekszik, ahogyan az illető tudományterület kutatása egyre több kutatót vonz, és a produktivitás időben növekszik. Például a szénnanocsövek esetében ezt a következő egyenlet és a 4. ábra mutatja be:

$$\Delta \text{ cikkek száma} = 0,09 (\Delta \text{ szerzők száma})^{1,32}$$

A grafénkutatásban az α értéke 1,32-nél nagyobb [12].

Ezért sem nevezhető túlzásnak a Nature Nanotechnology 2010. november 4-i vezércikkének az az állítása, hogy a fullerénnel, nanocsövekkel és grafénnal foglalkozó, növekvő számú szerzőt (kutatót) egybeforrott, egységes témaközösségnek tekintik. Mint az egyenlet mutatja, ez a közösség is exponenciálisan növekszik.

Jövőbeni növekedés, remények

A szénttudomány különböző alterületein elért ismeretek robbanásszerű növekedése, a további fejlődési remények már-már szakmai türelmetlenségként jellemezhető elvárásokat is felvetnek. Erre utal például egy nemrég publikált cikk címe: „Buckyballs, nanotubes and graphene: On the hunt for the next big thing” (Fullerének, nanocsövek és grafén: vadászat a következő nagy „valamire”) [13].

Nem fukarkodnak remények kifejezésében a grafénről 2011 elején publikált eszmefuttatások sem.

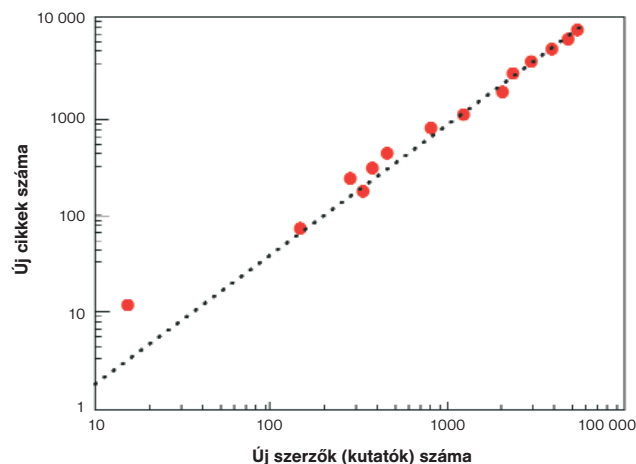
A Nature Nanotechnology folyóirat „The Rise and Rise of Graphene” (A grafén folyamatos növekedése) címmel közölt magasztaló vezércikket [14], amiben főleg az elektronikai és az abból várható technológiai alkalmazások lehetőségeit hangsúlyozták. Ugyanott emelik ki, hogy a fullerénnel, nanocsövekkel és grafénnal együttesen foglalkozó cikkek száma 1998 óta exponenciális növekedést mutat, és a három szénttudományi terület együttes kétszereződési sebessége öt év. Ez különben bizonyos összhangban van az e dolgozatban a három alterületre külön-külön számolt kétszereződési adatokkal is.

Nem kevésbé lelkesedő egy a Nature Materials folyóiratban „It is Still All About Graphene” (Még mindig minden a grafénről szól) [15] megjelent vezércikk.

A grafénismeretek említett robbanásszerű növekedéséhez, mint említettük, az alapkutatással párhuzamosan jelentős műszaki fejlesztések reményeit fűzik. Ezekben rejtőzhetne például a fentebb említett „next big thing” (a következő nagy valami)?

Mindez ugyanis egy másik elem, a szilíciumtudományhoz, illetve az abból kifejlesztett műszaki fejlődéshez, fejlesztéshez, a tranzisztorteknológiához kapcsolódhat.

Gordon Moore [16], a világhírű Intel cég egyik alapítója 1959 óta gyűjtött adatok alapján 1965-ben tett előrejelzése azt mond-



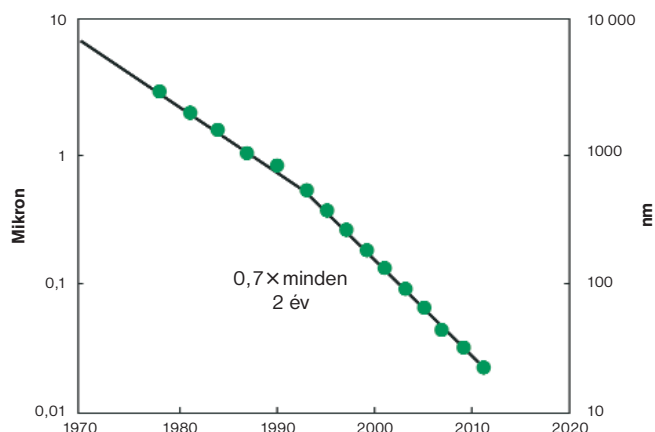
4. ábra. A szénnanocsövekkel foglalkozó cikkek szerzőinek produktivitása (cikk/szerző) [11]

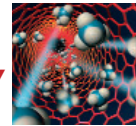
ta ki, hogy egy számítógépes chipben tartalmazott szilícium-alapú tranzisztorok száma két évenként megkétszereződik, ami azt jelentette, hogy a számítógépes műveletek sebessége, a MIPS (Millions of Instructions Per Second) ugyanilyen mértékben gyorsul. Abban az időben a számítógépes processzorok 2200 tranzisztort tartalmaztak. Moore előre jelezte, hogy a következő generációkban fokozatosan olyan chipek épülnek, amelyek egymilliószor összetettebbek lesznek, azaz milliónyi tranzisztort tartalmazhatnak majd. Előrejelzése „Moore törvénye”-ként vált közhírré.

Mint a fentiekben megfigyelhető, a szénkémia (különösképpen a grafén) tudományos kutatásában és a szilíciumra alapozott tranzisztorteknológiai fejlődésben az exponenciális növekedés a közös vonás. Mindmáig azonban nyitott kérdés, hogy milyen mechanizmussal és időben mikor történik, vagy történhet meg az átjárás a tudományos kutatási tevékenységet tükröző cikkek és a műszaki fejlődést jellemző tulajdonság (jelen esetben: az egységnyi felületre felépíthető tranzisztorok száma) exponenciális növekedése között.

Úgy tűnik azonban, hogy a közös nevező, például a fullerének, illetve a szilíciumalapú tranzisztorok esetében az exponenciális növekedés nem tartható fenn korlátlan ideig, illetve az, hogy azt törvényszerűen logisztikus növekedésnek kell követnie. Ennek értelmében egyes hangok már elkezdtek kongatni a lélekharangot a szilíciumalapú tranzisztorok és persze Moore törvénye fölött olyan blakkfangos cikkcímek mögött, mint például „Moore’s Law No More” (Moore törvényével nincs tovább) [17]. Bár a szilícium-

5. ábra. Tranzisztorok méreteinek exponenciális csökkenése [16]





tranzisztorokkal kapcsolatos ilyen mértékű pesszimizmus ma még messze nem teljesen indokolt, bizonyos adatok arra engednek következtetni, hogy a nem túl távoli jövőben a Moore-féle exponenciális görbe szerinti tranzisztorméret-csökkenésből (5. ábra) a jelenlegi körülbelül 22 nm-es szilíciumtranzisztor méretet már valószínűleg nem lehet tovább csökkenteni (egy átlagos emberi hajszál átmérője körülbelül 80 000 nm).

Ez azt jelenti, hogy a nem túl távoli jövőben a szilíciumalapú tranzisztorokat valami új összetételű anyagból állóakkal kellene helyettesíteni.

Erre a feladatra a grafént vélik alkalmasnak. Feltételezik, hogy a grafén alapján a tranzisztorok [20] méretét körülbelül egy szénatomnyi vastagságúra és körülbelül 50 szénatomnyi szélességűre csökkenthetik. Ezt annak alapján is teszik, hogy az ultraminiatűr méreteknél a grafén a szilíciumnál stabilabb viselkedést mutat. Ezen az úton a „kvantumponszerű” [21] chip megépítéséhez remélnek eljutni, ahol az egyedi tranzisztorok mérete már tulajdonképpen nem nagyobb egy molekulánál.

Szakterület	Folyóiratcikkek száma	%
Kondenzált anyagfizika	2701	33
Multidiszciplináris anyagtudomány	2306	28
Alkalmazott fizika	1607	20
Fizikai kémia	1495	18
Nanotudomány, nanotechnológia	1433	18
Multidiszciplináris kémia	1122	14
Multidiszciplináris fizika	1057	13
Atomi, molekuláris és kémiai fizika	418	5

1. táblázat. Grafén témájú folyóiratcikkek szakterületi eloszlása

Visszatérve a szilíciumalapú tranzisztorteknológia Moore szerinti exponenciális növekedésének, illetve az azzal járó exponenciális méretcsökkenés 2010-es évek utáni tarthatatlanságához, talán nem túlzott optimizmust tükröz az a feltételezés, hogy a tranzisztorteknológia jövőbeni fejlődését a jelenleg is érvényes graféntudományi kutatás exponenciális növekedése biztosítja majd.

Ilyen értelemben az *exponenciális növekedés (szilícium) exponenciális növekedéséről (grafén)* beszélhetünk. Bármennyire szokatlanok is tűnnek ez a feltételezés, bizonyos előzmények fellelhetők a szakirodalomban. Ugyanis 2001-ben publikált dolgozatában a jövőkutató Ray Kurzweil [22] főleg más műszaki fejlődési példákkal illusztrálva feltételezett ilyenfajta növekedést, illetve fejlődést.

Interdiszciplináris széntudomány

Mint ismeretes, a fullerének felfedezői, Harold Kroto, Richard Smalley és Richard Curl vegyészek, Wolfgang Krätschmer és Donald Huffman asztrofizikusok. Sumio Iijima fizikusi alapképzettséget kapott, Andre Geim és Konstantin Novoselov is fizikusok.

Már csak ennek a szakterületi felsorolásnak az alapján is nyilvánvaló, hogy a széntudomány legújabbkori fejlődése kifejezetten az interdiszciplinaritás jegyében zajlott. A huszadik század közepére bizonyos elhanyagoltság után az interdiszciplinaritás fogalma újból teret kezdett nyerni a tudományokban és azok működ-

tetésében (science policy) egyaránt. Mindkét kontextusban az interdiszciplinaritás olyan irányzattá vált, amelyet a tudományos kutatás és intézményi rendszere reformjának a szinonimájaként kezeltek [23].

A széntudományra visszatérve például a grafénkutatás diszciplináris szerkezetének a bemutatását a Reuters–Thomson cég nagy számítógépes adatbázis által feldolgozott folyóirat-összetételének a vizsgálata lehetővé teszi.

Az 1. táblázat szemlélteti a graféncikkeket publikáló folyóiratok szakterületi beosztásán alapuló százalékos hovatartozásokat.

A kutatások multidiszciplinaritása szembetűnő, bár az eredeti felfedezők (Geim, Novoselov) fizikusi alapképzettsége következtében bizonyos mértékben eltolódik a fizika alterületei felé. Nem vitatható azonban az sem, hogy a kémia és alterületei, valamint a nanotudomány, az anyagtudomány és a nanotechnológia jelenléte is meglehetősen hangsúlyos. Mindezek együttműködése olyan átfedések által meghatározott tudáskiterjedéseket katalizált, amelyek jelentősen hozzájárultak és jelenleg is meghatározzák a széntudomány jelentős fejlődését.

Utóirat

Az utóbbi évek széntudományi előretörését, illetve a fejlődés sebességét tekintetbe véve könnyen elképzelhető, hogy a grafénkutatás exponenciális növekedését és az egy chipen elhelyezhető szilíciumalapú tranzisztorok számának exponenciális növekedését Kurzweil elképzelése szerinti exponenciális kettőződés hozza meg, a Nature-vezércikkben feltételezett „next big thing”-et (következő nagy dolgot) például graféntranzisztorok képeiben. Azonban az sem zárható ki, hogy valami teljesen váratlanul új széntudományi ismeret, felfedezés jelenik meg a tudományos kutatás horizontján.

IRODALOM

- [1] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brian, E. R. Curl, R. E. Smalley, *Nature* (1985) 318, 162.
- [2] W. K. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, *Nature* (1990) 347, 354.
- [3] S. Iijima, *Nature* (1991) 354, 56.
- [4] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Shang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsanov, *Science* (2004) 306, 866.
- [5] The Kavli Prize in nanoscience, <http://op.nature.com/BhjsIQ>
- [6] Braun Tibor, *Magy. Kém. Lapja* (2010) 64, 371.
- [7] D. de Solla Price, *Science since Babylon*, Yale University Press, New Haven, London, 1975.
- [8] D. de Solla Price, *Kis tudomány, nagy tudomány*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1979.
- [9] M. Moravcsik, *Res. Policy* (1975) 4, 80.
- [10] Braun Tibor, *Magy. Kém. Lapja* (2009) 66, 21.
- [11] L. M. A. Bettencourt, D. I. Kaiser, J. Kaur, C. Castillo-Chavez, D. E. Wojick, *Scientometrics*, (2008) 75, 495.
- [12] L. M. A. Bettencourt, *személyes közlés*
- [13] A. Plume, *Res. Trends* (2010) 12, 9.
- [14] Editorial, *Nature Nanotechnology* (2010) 5, 1.
- [15] Editorial, *Nature Materials* (2010) 10, 1.
- [16] <http://www.intel.com/technology/mooreslaw>
- [17] R. Rockets, <http://www.scienceagogo.com/news/moore.shtml>
- [18] http://www.cyber-aspect.com/features/feature_article~art104.htm
- [19] <http://www.kurzweilai.net/articles/art0134.html?printable=1>
- [20] Anon. *Science Daily*, February 9, 2009, <http://www.sciencedaily.com/releases/2009/02/09020502.htm>
- [21] *Science Daily*, April 18, 2008, <http://www.sciencedaily.com/releases/2008/04/080417142452.htm>
- [22] Wikipedia. Kurzweil and the Law of Accelerating Returns. http://en.wikipedia.org/wiki/Law_of_accelerating_returns
- [23] P. Weingart, N. Stehr (Ed.): *Practicing Interdisciplinarity*, University of Toronto Press, Toronto, 1999.
- [24] A. Barth, W. Marx, *arXiv.org*>0808.3320, 25 August, 2008.