

MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI
KUTATÓINTÉZETEK

ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET

4026 Debrecen, Bem tér 18/c, 4001 Debrecen, Pf. 51.
Telefon: 06-52-417266, Fax: 06-52-416181
e-mail: rgl@atomki.hu, honlap: <http://www.atomki.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet alapfeladatai 2004-ben nem változtak; az alapító okiratban foglaltak szerint a következők: Alap- és alkalmazott kutatások folytatása az atommagfizikában és atomfizikában. Fizikai ismeretek és módszerek alkalmazása más tudományágakban (anyagtudomány és anyagvizsgálat, földtudományok és környezetkutatás, orvosi-biológiai kutatások stb.) és a gyakorlatban (ipar, mezőgazdaság, orvosi gyakorlat stb.). Alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése. Közreműködés a felsőoktatásban.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Szubatomifizika

Részecskefizikai kutatások

A CERN-beli ASACUSA kísérlet keretében újabb nagyságrenddel pontosították az antiproton tömegére és töltésére kapott korábbi értékeket. Csatornahatást mutattak ki az antiprotonos He atomok idegen atomokkal való ütközésében. [Nagyobb csoport, ATOMKI: 2 fő, intézeti ráfordítás 9,0 (pályázati forrásból 2,1) Mft]

Az 1998-2000 években gyűjtött OPAL adatokból meghatározták az egyszeres pászma inkluzív képződésének hatáskeresztmetszetét, folytatták a hadronképződés teljes hatáskeresztmetszetének analizálását. [Nagyobb csoport, ATOMKI: 4 fő, ráford. 9.0 (pály. 3,0) Mft]

Teljes mértékben feltárták a kvantum-színdinamikai (QCD) mátrixelemek szingularitási szerkezetét arra az esetre, amikor egy vagy két végállapotú részecske kinematikailag feloldhatatlanná válik. [2 (2) fő, ráford. 3,5 (pály. 0,5) Mft]

Kísérleti magfizika

Az *extrém magállapotok vizsgálata körében* a RIKEN (Japán) intézettel folytatott együttműködés során a ^{16}C atommag első gerjesztett állapotának a radioaktív ^{16}C nyaláb rugalmatlan szórásával mért élettartamát meglepően nagynak találták, azaz az átmenet valószínűségét rendkívül kicsinek. Radioaktív ^{16}C atommagokat szórátva ^{208}Pb atommagokon megmérték a ^{16}C első gerjesztett állapotának előállításának valószínűségét. Kimutatták, hogy ez az állapot gyakorlatilag tiszta neutrongerjesztésként értelmezhető. A ^{14}C törzsön kívüli két valencianeutron nem polarizálja a törzset, tehát a törzssel való kölcsönhatása sokkal gyengébb, mint az a stabilitási sáv közelében megszokott. A stabilitási sávtól igen messze elhelyezkedő ^{27}F atommag két kötött gerjesztett állapotát mutatták ki. A

kötött gerjesztett állapotok léte azt igazolja, hogy a ^{27}F -ben legalább az egyik héjzáródási effektus megszűnt. E gerjesztett állapotok létének teljes körű magyarázata kihívást jelent az elméleti magfizika számára, hiszen jelenleg nem ismert olyan számolás, amely több kötött gerjesztett állapotot jósolna erre az atommagra. [40 (8) fő, ráford. 51,0 (pály. 1,3) MFt]

A forgási sávoknak az $A\sim 130$ és az $A\sim 100$ magtartományok páratlan-páratlan magjaiban való duplázódását észlelték széles nemzetközi együttműködésben az EUROBALL+DIAMANT detektorrendszerrel. A ^{105}Rh magban a három valenciáreszeccskés forgási sáv királis duplázódását mutatták ki, igazolva ezzel a magtörzs háromtengelyű deformációját. [26 (7) fő, ráford. 20,0 (pály. 2,0) MFt]

A CERN ISOLDE nagyberendezésén a Lucrecia detektorral vizsgálva a ^{76}Sr atommag béta bomlását követő gamma-sugárzásokat kimutatták, hogy a ^{76}Sr már az alapállapotában is közel szuperdeformált. Ilyen, 2:1 tengelyarányú állapotokat eddig csak gyorsan forgó atommagokban sikerült előállítani. Az egyforma proton- és neutronszámmal rendelkező atommagok közül jelenleg ez az atommag bizonyult a legnagyobb mértékben deformáltnak. [18 (1) fő, ráford. 8,0 (pály. 0,5) MFt]

A nukleáris asztrofizikai kutatások körében a hidrogénégés CNO ciklusában kulcsszerepet játszó $^{14}\text{N}(p,\gamma)^{15}\text{O}$ reakció hatáskeresztmetszetének extrém alacsony energián szilárd céltárgyon történő meghatározása új adatokat szolgáltatott a világegyetem gömbhalmazainak életkorára és a Napból származó CNO eredetű neutrínófluxus nagyságára. A mérések alapján a Világegyetem kora kissé nagyobbak adódik, mint azt korábban feltételezték. [32 (3) fő, ráford. 6,0 (pály. 2,0) MFt]

Abszolút rezonanciaerősségeket határoztak meg a $^{6,7}\text{Li}(\alpha,\gamma)^{10,11}\text{B}$ reakciókban, amelyek segítségével az ERNA (Bochum, Németország) tömegszeparátor akceptanciájának precíz mérése vált lehetővé. [5 (4) fő, ráford. 5,5 (pály. 1,5) MFt]

Nagyszámú szilárd anyagban meghatározták a $d(d,p)t$ reakcióban fellépő anomálishan magas elektronárnyékolási potenciál nagyságát. Az effektusra lehetséges magyarázatot találtak a plazmafizika Debye-elmélete segítségével. [24 (3) fő, ráford. 5, (pály. 1,5) MFt]

Orvosi, valamint anyagvizsgáló alkalmazásokat szolgáló izotópok ciklotronnal való termelésének megalapozásához folytatták a megfelelő reakció-hatáskeresztmetszetek adatbázisainak ellenőrzését, összeállítását és kiegészítését új mérési adatokkal. Proton nyalábokkal Mo, Y, Ag, Ir, Pd, Cd, Tm, Zn, Pr; deuteron nyalábokkal Cd, Pt, Ir, Ag, Mo, Pd, Pb; α -részekkel Pt, ^3He részekkel Co és Cr céltárgyakon indukált több száz magreakció gerjesztési függvényének kísérleti meghatározását és elméleti számításokkal való egybevetését végezték el. [6(4) fő, ráford. 32,0 (pály. 1,5) MFt]

Elméleti magfizika

Megvizsgálták, hogy ugyanazon atommag alap- és gerjesztett szuper- és hiperdeformált állapotában milyen csomósodás (klaszterizáció) alakulhat ki. Kimutatták, hogy a Pauli-elv figyelembe vételével egyetlen klaszterkonfiguráció is képes a három, nagyon eltérő magalakot előállítani. [4 (2) fő, ráford. 6,5 (pály. 0,5) MFt]

Megadták az atommagok kvadrupólus típusú kollektív gerjesztéseit leíró Bohr-féle Hamilton-operátor egzakt megoldásait csak az alakváltozótól függő potenciálok esetében. Ezzel lehetővé tették a gömbszerű és instabil magalakok között megfigyelhető, E(5) szimmetriával jellemzett fázisátmenet analitikus leírását. Konkrét példaként a ^{134}Ba atommagot tárgyalták. Megerősítették a páros tömegszámú Ru izotópokra vonatkozó ama sejtést, hogy A=104-nél átmenet zajlik le a gömbszerű és instabil fázisok között. [2 (1) fő, ráford. 1,7 (pály. 0,2) MFt]

Új közelítésben, az alapállapotú rotációs sáv mellett a vibrációs sáv jelenlétét is figyelembe véve írták le a ^{141}Ho atommag protonbomlását. A bomlási szélességeket négyzetesen integrálható bázist használva számították ki. [2 (1) fő, ráford. 8,5 (pály. 0,3) MFt].

Atomfizika

Ionizációs jelenségek vizsgálata

Az Oului Egyetem (Finnország) kutatóival együttműködésben, az Ar 3p héjáról lineárisan polarizált fotonokkal kiváltott fotoelektronok szögeloszlását határozták meg a 90 – 330 eV-es energiatartományban a Max-II szinkrotron (Lund) röntgennyalábjára telepített ESA-22 jelű elektronspektrométerükkel. A kiemelkedően jó energiefeloldásnak köszönhetően a $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ alhéjakhoz tartozó vonalak teljesen elkülönültek (a két vonal távolsága kb. 170 meV), így sikerült mindkét vonalra meghatározni a szögeloszlás dipól és nem-dipól jellegű járulékait jellemző anizotrópia-paramétereket. Ez az első olyan kísérlet ebben a fotonenergia-tartományban, amelyben a két alhéjról származó fotoelektronok anizotrópiaparamétereit külön-külön is meghatározták; a magasabb rendű tagok járulékát korábban egyáltalán nem vizsgálták. A mért anizotrópiaparaméterek a direkt és indirekt fotoionizációs folyamatok közötti jelentős interferenciára utalnak. [10 (5) fő, ráford. 7,0 MFt].

A hidrogénmolekula ionizációjában fellépő koherens folyamatok vizsgálatára irányuló amerikai-francia-magyar-német együttműködés a magasabb rendű interferenciaeffektusok kimutatásával részben lezárult. [5 (2) fő, ráford. 6,5 (pály. 0,3) MFt].

Ion-atom ütközések kutatása

Az ionizáció folyamatában kilépő elektronokat nagy energiákra gyorsító többszörös elektron-szóródási mechanizmus (az ún. Fermi-shuttle jelenség) kutatásában mérésekkel és klasszikus pályák számításán alapuló Monte Carlo (CTMC) számolásokkal kimutatták, hogy a lassú nehéz ionok és atomok ütközéseiben emittált elektronok spektrumát nagyrészt ez a mechanizmus határozza meg, így a nehéz ionok anyagokban történő fékeződésének végső szakaszában a 10-200 eV-es energiatartományba eső elektronok emissziója igen jelentős folyamattá válhat. A jelenség a biológiai szövetek sugárkárosodásával kapcsolatban lehet nagy jelentőségű, pl. a nehézion-besugárzásos terápia tervezésekor. Kutatása a jövőben a COST P9 akció („Sugárkárosodás biológiai rendszerekben”) keretében kibontakozó nemzetközi együttműködés egyik témája lesz. [7 (4) fő, ráford. 10,0 (pály. 0,4) MFt]

Pozitron–molekula ütközések

A *University College London* (UCL) munkatársaival együttműködésben folytatták pozitron-lövedék folytonos energiájú állapotokba történő elektronbefogási (ECC) folyamatának

vizsgálatát. Kimutatták, hogy az elektronspektrumban megjelenő előre irányuló csúcs helyzete H_2 , D_2 és He céltárgy esetén egyaránt eltér az elmélet által jelzett értéktől: annál kisebb energiájú. Egy további mérési sorozatban gáz céltárgyon szórt pozitron-lövedék energiaeloszlásában hasonló mértékű, de ellentétes irányú energiaeltolódást kaptak, mint az elektronok esetén. Mérési eredményeik szerint az ütközés utáni kölcsönhatás e folyamatban sokkal erősebb, mint azt a jelenlegi elméletek jósolják. [2 (1) fő, ráford. 2,2 (pály. 1,2) MFt].

Plazmafizikai kutatások

A CERN továbbfejlesztett ROOT programcsomagjával befejezték az ATOMKI ECR ionforrásában előállított argon, xenon és vas plazmákról készített több ezer röntgenfelvétel kiértékelését. Bebizonyították, hogy az ún. párolgásos hűtés jelensége mutatható ki az ECR-plazmákban: a könnyebb argon nagyobb mozgékonyasága révén energiát visz el a xenon-ionoktól, így azok magasabb állapotokig ionizálhatók. Ez az eredmény segítheti az asztrofizikai és más típusú plazmák viselkedésének megértését is. A kutatás folytatása elsősorban az alap kutatás számára fontos, de értékes eredményeket szolgáltathat az űrkutatás számára is. [10 (3) fő, ráford. 3,0 (pály. 0,4) MFt]

Biológiai vonatkozású atomfizikai kutatások

Víz-molekulák ionbombázás hatására fellépő fragmentációjának tanulmányozása érdekében különböző töltésállapotú He és Ne ionokkal bombáztak víz-molekulákat, és vizsgálták az ütközésből kilépő H, O és OH ionok szög, energia és töltésállapot szerinti eloszlását. A kis energiájú (1-20 keV) ionokkal végzett mérések a berlini Hahn-Meitner intézetben, a nagyobb energiájú (800 keV) héliumionokkal végzett első mérések az ATOMKI Van de Graaff gyorsítója mellett történtek. Kis energiákon a víz-molekula felrobbanását előidéző domináns folyamat az elektronbefogás, nagyobb energiákon a fragmentációért elsősorban az ionizációs folyamat a felelős. A munka a COST P9 akció ("Sugárkárosodás biológiai rendszerekben") részét képezte. [6 (2) fő, ráford. 6,5 (pály. 0,4) MFt].

Elméleti atomfizika

Az argonatom közepes- és nagyenergiájú protonokkal történő bombázása során emittált elektronok totális és differenciális hatáskeresztmetszet-eloszlását tanulmányozva rámutattak a perturbációs modellek hiányosságaira az alacsonyabb ütközési energiákon. Torzított hullámú és csatolt csatornás modellek alkalmazásával elemezték az elektronok korrelációját és kicserélődését leíró potenciálok szerepét az ionizáció folyamatában, megkérdőjelezve néhány leírás pontosságát. Egy az irodalomban ionizációs hatáskeresztmetszetek számítására publikált számítógépes program pontatlanságaira is rávilágítottak. Az egyszeres ionizáció folyamatát a lövedék által átadott impulzus és a kilökött elektron energiájának függvényében tanulmányozva rámutattak a passzív elektron sztatikus árnyékoló szerepének fontosságára mind az elektronnal, mind pedig a lövedékionnal történő kölcsönhatások során. A problémára kidolgozott modellek egyikével sem lehetett lényeges javulást elérni a kísérleti adatok reprodukálásában. Az eltérésekért a dinamikus árnyékolás tehető felelőssé, amit egy egyszerű, függetlenrészecske-modell keretében elvégzett számítással igazoltak is. A pontosabb leírás valószínűleg a négytest dinamikát jobban tükröző modell keretében adható meg. [3 (1) fő, ráford. 6,5 (pály. 0,4) MFt].

Kondenzált rendszerek kutatása, alkalmazott elektronspektroszkópia

Anyagkutatás erősen töltött nehéz ionokkal

ECR-rel előállított nagytöltésű Xe ionokkal bombázva Se és SbSJ félvezető fóliák felületét a várt kráterek helyett 1-5 nm magas, kiemelkedő csúcsokat figyeltek meg. A besugárzott minták kiértékelését atomerő-mikroszkóppal (AFM) végezték. További szellemi és anyagi ráfordítás esetén mind az alapkutatás, mind a félvezetőipar számára értékes eredmények várhatók. [6 (3) fő, ráford. 6,0 (pály. 0,5) MFt].

Német–magyar együttműködésben vizsgálták többszörösen töltött ionok áthaladását polietilén-tereftalát fóliában létrehozott nano-kapillárisokon. Ezek a csövecskék képesek arra, hogy néhány keV energiájú 7-szeresen töltött neon ionokat eredeti töltésállapotukban átengedjenek, akkor is, ha azokat az ionok beérkezési irányához képest 5-10 fokkal elfordítjuk. Ezt a csatornahatásra emlékeztető jelenséget a szigetelő csatornák belső felületének “önszerveződő” módon létrejövő feltöltődése hozza létre. Vizsgálták a folyamat ionenergia-, töltésállapot-, kapillárisátmérő- és kapillárisűrűség-függését, tökéletesítették a jelenséget leíró elméleti modellt. Megtették az első lépéseket egy debreceni munkacsoport megszervezésére, amelynek tervezett tevékenysége a kapillárisok előállításától kezdve a maratáson és a geometriai paraméterek meghatározásán át az ionterelési jelenség méréséig és megértéséig terjed. [4 (1) fő, ráford. 6,0 (pály. 0,3) MFt]

Alkalmazott elektronspektroszkópai kutatások

Amorf Ge mintákon meghatározták az elektronok rugalmatlan szórás közepes szabad úthosszát a 7–10 keV energia tartományban. A nyert adatok újszerű megjelenítése lehetővé teszi egyszerű korrigálásukat későbbi, pontosabb referencia-adatok alapján. [8 (6) fő, ráford. 5,4 (pály. 0,4) MFt]

Al, Ge, Si felületekről visszaszórt 0,2-10 keV primer energiájú elektronok energiavesztési spektrumait mérve meghatározták a rugalmatlan szórás hatáskeresztmetszetének energiafüggését, megadva az adatok analitikus függvényekkel történő leírását is. [5 (5) fő, ráford. 5,6 (pály. 0,6) MFt]

Magyar–kínai együttműködés keretében ezüst mintáról visszaszórt elektronok energiavesztési spektrumait mérték, a kísérleti adatokból effektív energiavesztési függvényeket származtattak. Az így meghatározott függvényeket Monte Carlo szimulációkban alkalmazva jó egyezést kaptak a kísérleti spektrumokkal. [8 (4) fő, ráford. 5,4 (pály. 1,4) MFt]

Kimutatták, hogy a polikristályos Ge filmekből fotonokkal keltett $KL_{23}L_{23}$ Auger spektrumokban megjelenő intenzív szatellit vonal nagyrészt a plazmongerjesztésből származó kezdeti K-vakanciához rendelhető. [6 (5) fő, ráford. 5,6 (pály. 0,6) MFt]

Polikristályos Fe és Co mintákból a K-ionizációs küszöb körüli energiájú fotonokkal keltett KLL Auger folyamatok rezonáns Raman jellegét mutatták ki. [5 (3) fő, ráford. 3,9 (pály. 0,9) MFt]

Polimerekről és polikristályos vegyületekről visszaszórt elektronok spektrumában elsőként mutatták ki, azonosították és értelmezték a hidrogénatomokon történt rugalmas elektronszórás miatt megjelenő csúcsot. [6 (6) fő, ráford. 6,5 (pály. 0,5) MFt]

Rétegszerkezetek vizsgálata

„In situ” előállított MnO nanorétegeken nagy energiafelbontással mérték a rezonáns energiájú fotonokkal keltett Mn KLL Auger spektrumokat. A megjelenő intenzív szatellit csúcs eredetét multipliett felhasadásként azonosították. [5 (3) fő, ráford. 3,7 (pály. 0,7) MFt]

Kinematikai modellezéssel meghatározták, hogy koncentrációfüggő diffúziós együtthatóval rendelkező anyagpárokból felépülő epitaxiális multirétegekben az éles határfelület eltolódása ill. az elkent határfelület kiélesedése milyen hatást gyakorol a nagyszögű röntgendiffrakciós szatellitok intenzitásarányaira. [5 (2) fő, ráford. 2,2 (pály. 0,2) MFt]

Cu/Ni multirétegekben meghatározták a rétegek orientációját és a határfelületek profilját. Megállapították, hogy hőkezelés hatására a mágneses ellenállás éles határfelület esetén jobban megváltozik, mint diffúz határfelületnél. [7 (5) fő, ráford. 5,4 (pály. 0,35) MFt]

SIMS/SNMS és TEM segítségével vizsgálták a Si/Si_{1-x} Sb_x/Si (x = 18 és 24 at%) trirétegekben hőkezelés hatására, 100 bar hidrosztatikus nyomáson végbemenő szilárdtest reakciókat. Igazolták, hogy a mikroszkópos vizsgálatok során látott kontrasztkülönbségek valóban a határfelületekkel párhuzamosan kialakuló Sb rétegeket jelzik. [7 (1) fő, ráford. 1,3 (pály. 0,3) MFt]

Si hordozón kialakított Cu/Ta birétegek termikus viselkedését vizsgálva Auger elektron spektroszkópiával a Ta-nak a Cu filmen keresztül történő szemcsehatár menti diffúzióját és a réz felületen történő felhalmozódását figyelték meg. Meghatározták a Ta szemcsehatár diffúziójára vonatkozó aktivációs energiát. [9 (2) fő, ráford. 2,3 (pály. 0,3) MFt]

Földtudomány és környezetkutatás, régészet

Könnyűelem-izotópgeokémia és alkalmazásai, geokronológiai, földtani anyagvizsgálati és régészeti kutatások

Az *izotóphidrológiai kutatások* körében izotóphidrológiai és vízkémiai vizsgálatokkal kimutatták, hogy a Lónyay-főcsatorna vízgyűjtő területének mely főfolyásait alkotja mélységi eredetű, idős rétegvíz, és melyek a talajvízből, illetve csapadékvízből táplálkozó főfolyások. Megállapították, hogy a főcsatornán Kemece után idős rétegvíz keveredik a vízfolyáshoz. Az idős víz megjelenése magyarázatul szolgálhat a főcsatornán a beömlésekhez képest tapasztalt többlet vízhozam eredetére is. A Tiszát kísérő állóvizek közül a boroszlókert (Gulács) Holt-Tisza területéről, felszíni és sekély fúrásokból származó vízminták vizsgálatával kimutatták, hogy a holtágban található felszíni víz csapadék eredetű, a talajvíz ennek a víznek a leszivárgásából származik. A Tisza vízének hozzájárulása a talajvízhez a nyári, alacsony vízállás mellett kizárható. A Tisza magyarországi szakaszán és mellékfolyóin végzett izotóp-hidrológiai vizsgálatok azt mutatják, hogy a hazai beömlések alárendelt szerepet játszanak a folyó vízhozamában, a folyó vizét teljes magyarországi szakaszán a Kárpátokban hullott csapadék uralja. [6 (6) fő, ráford. 9,0 (pály. 5,0) MFt]

A *geokronológiai kutatások* körében kimutatták, hogy az alacsony fokú metamorfózis utolsó fázisa a Bükkium területén a kréta közepén és végén, a horvátországi Medvednica-hg-ben pedig az egész krétára kiterjedően zajlott le. [2 (2) fő, ráford. 1,4 (pály. 0,6) MFt]

A Loucná–Oberwiesenthal vulkáni központban a vulkáni működéshez alsó-középső oligocén kor rendelhető. Az ennél idősebb korok látszólagosak, kimutatható, hogy többlet Ar miatt alakultak ki. [1 (1) fő, ráford. 0,5 (pály. 0,25) MFt]

Magyar–bolgár–görög együttműködésben kimutatták, hogy a keleti Rodope nagyterjedésű, változatos vulkáni kőzetei a korábbi földtani modellekkel ellentétben nem a miocénben, hanem 29–31 millió évvel ezelőtt keletkeztek. [5 (1) fő, ráford. 0,4 (pály. 0,0) MFt]

A *régészeti kutatások* körében meghatározták az első magyarországi állandó Tisza-híd korát (a török hódoltság kora). [8 (5) fő, ráford. 0,4 MFt]

A bioszféra radioaktivitásának vizsgálata, légköri aeroszolk kutatása

A *nukleáris létesítmények környezeti hatásainak vizsgálata* keretében – folytatva a paksi atomerőmű radioaktív kibocsátásainak monitorozásával kapcsolatos munkákat – a mérési eljárások egyeztetését végezték el cseh kutatóintézetekkel.

A *radon természeti előfordulásának kutatása* keretében igazolták, hogy egyes hévizes eredetű barlangok légterében megfigyelt kiemelkedően magas, éves átlagban 100 kBq m^{-3} -t is elérő ^{222}Rn -aktivitáskoncentráció fő forrása a barlangi légtérrel kapcsolatban lévő hévíz. [5 (2) fő, ráford. 1,5 MFt]

A *légköri aeroszolk kutatása* keretében a régió légköri aeroszolverhelését jelző adatbázisukat az aeroszolk PM10 és PM2.5 tömegeire, elemi szén (BC) tartalmára, fontosabb elemi összetevőinek koncentrációjára vonatkozó új adatokkal bővítették ki. Hét év adatait értékelve azok szezonális és évenkénti változásait, egyes kibocsátó forrásait határozták meg. Sikeresen lezárták az NKFP 3/005/2001 programot. [8 (8) fő, ráford. 26,0 (pály. 2,8) MFt]

Radiokémiai, orvosi és biológiai célokat szolgáló kutatások

A *radiokémiai kutatások* keretében rendszeresen állítottak elő L-[11C]metionin radiofarmakont humán diagnosztikai célra, optimális eljárást dolgoztak ki ^{76}Br előállítására. [3 (3) fő, ráford. 24,0 (pály. 0,8) MFt]

A *biológiai célú kutatásokban* az EU-5 NANODERM projekt keretében (szolgáltatóként ill. külső közreműködőként) a fizikai napvédő kozmetikumokból a bőrre kerülő nehézfém (elsősorban TiO_2 és Zn) nanorészecskék bőrbe való behatolását, transzportját és emberi egészségre gyakorolt hatását vizsgálták. Megmérték a nanorészecskék nehézfém-koncentrációját és eloszlását a bőr különböző rétegeiben. [30 (4) fő, ráford. 16,0 (pály. 1,8) MFt]

A szív- és érrendszeri betegségek korai stádiumára jellemző állapotok vizsgálata keretében az irodalomban elsőként pontos, kvantitatív adatokat szolgáltatottak a humán fő nyaki verőér elemeloszlásáról. [8 (5) fő, ráford. 4,0 (pály. 0,1) MFt]

Komplex terepi méréseket végeztek a középhegységi tölgyeseink domináns fafajait képviselő tölgyfajok viselkedésének összehasonlítására. Meghatározták a nedvháztartást befolyásoló talajtani, meteorológiai és növényhidraulikai jellemzőket, valamint a fényhasznosítást és a CO₂ forgalmat meghatározó növényfiziológiai mennyiségeket. Az eredmények alapján mélyebb értelmezést lehetett adni két faj eltérő klímaérzékenységére. [5 (2) fő, ráford. 2,0 (pály. 0,2) MFt]

Kutatási eszközök és módszerek fejlesztése, egyéb alkalmazott kutatások

Kis állatok vizsgálatára alkalmas pozitronemissziós tomográf („MiniPET”) folyamatban lévő fejlesztése során a hagyományos analóg jelfeldolgozás helyett digitális jelfeldolgozást alkalmaztak. Új algoritmusokat dolgoztak ki az alapvonal-helyreállító, a jelfelismerő, a csúcsetektor és az állandó arányú diszkriminátor egységek digitális megvalósítására. Az állandó arányú diszkriminátor időbizonytalanságát 1 ns-nak mérték, ami lényegesen jobb az irodalomban eddig közöltekénél. [30 (3) fő, ráford. 15,0 (pály. 10,0) MFt]

Az ECR ionforrásban C₆₀ (fullerén) + vas keverékplazmából sikerült jelentős intenzitással 720 + 56 = 776 tömegszámú FeC⁺₆₀ molekulaionokat kivonni. Jelenleg még nem eldöntött kérdés, hogy a vasatom a szénömb belsejében van-e, vagy ahhoz kívülről tapad. Amennyiben sikerülne makroszkopikus mennyiségben szénketreche zárt vasatomokat előállítani, ez az új anyag igen sok, elsősorban orvostudományi területen lenne felhasználható (pl. MRI kontrasztanyagként, tumorterápiában használható mágneses nanorészecskék előállítása, stb.). [5 (2) fő, ráford. 2,0 (pály. 1,0) MFt]

Az elektronok rugalmatlan szóródási folyamatának vizsgálata során feltárták egy 30 éve használt, de csak tapasztalati alapokon nyugvó adatértékelési eljárás fizikai alapjait. Kimutatták, hogy a korábbi állásponttal szemben az eljárás által feltételezett hatáskeresztmetszet tükrözhet valós fizikai folyamatot is. [5 (5) fő, ráford. 2,0 (pály. 0,0) MFt]

Az EU5 NAS-MICRO-XRF projekt keretében nemzetközi referenciaanyagok heterogenitását határozták meg, részt vettek új anyagok kifejlesztésében, valamint a szinkrotronra alapozott háromdimenziós μ XRF módszerek tesztelésében. Elsőként dolgoztak ki kombinált, kvantitatív kétdimenziós μ PIXE- μ XRF eljárást mikrometeoritok vizsgálatára és közöltek adatokat több mint negyven elemre. [30 (6) fő, ráford. 14,0 (pály. 4,0) MFt]

Kiemelkedő pontosságú mérő-, adatfeldolgozó és kiértékelő (PIXEKLM-TPI) rendszert fejlesztettek ki, amely egymást kiegészítő analitikai technikák (PIXE, STIM, RBS) egyidejű alkalmazásával lehetővé teszi inhomogén, szerves mátrixú vékony (10-50 μ m) minták abszolút elemkoncentráció-eloszlásának a meghatározását és valós elemterképeinek felépítését 1-2 mikrométer térbeli felbontással. [5 (5) fő, ráford. 8,0 (pály. 1,0) MFt]

Kidolgozták a standardokat nem igénylő mennyiségi analízis módszerét nitrogéntartalom deuteriumindukált gamma-emissziós (DIGE) meghatározására. [7 (5) fő, ráford. 3,0 (pály. 0,6) MFt]

Kiterjesztették a mikro-RBS technika alkalmazását nanoszemcsés vékonyrétegekre. Ezáltal lehetővé vált az elemi összetételre és a felületi egyenetlenségre vonatkozó információkon túlmenően a réteg nanoszemcsézettségére vonatkozó információk RBS spektrum alapján való értelmezése is. [5 (1) fő, ráford. 3,0 (pály. 0,6) MFt]

Si-PIN fotodióda spektrális tulajdonságait és a töltésbegyűjtés hatékonyságát határozták meg nagy laterális feloldással. Értelmezték a spektrumok kis energiájú részén jelentkező, a spektroszkópiai felhasználás lehetőségét korlátozó szatellit csúcsok eredetét, és megállapították azokat a feltételeket, amelyek mellett a Si-PIN fotodiódákat megbízhatóan lehet detektorként alkalmazni. [2 (2) fő, ráford. 4,0 (pály. 0,3) MFt]

Új módszert fejlesztettek ki a PET kamerákban használt szcintillátorok nagy laterális feloldású vizsgálatához, a "kölcsonhatási mélység" meghatározására. [9 (6) fő, ráford. 5,0 (pály. 0,3) MFt]

Folytatták a ^{14}C -izotóp-gyorsító tömegspektrometriára alkalmas Tandetron AMS berendezés telepítését. Kiépítették az AMS erősáramú ellátását, elektronikus vezérlését, SF_6 gázellátó rendszerét, szellőző- és pneumatikus működtető rendszerét. Összeszerelték, és vákuumpróbának vetették alá a Tandetron ionforrását és nyalábcsatornáját. [5 (5) fő, ráford. 10,0 MFt]

Az intézet elektronspektrométereikhez több kiegészítő egységet építettek és helyeztek üzembe (fűthető mintatartó, hordozható mintakamra, stb.). Megterveztek és megépítettek egy repülési idő spektrométert az ütközési folyamatok során nyalábirányban kibocsátott elektronok sebességeloszlásának meghatározására. [5 (5) fő, ráford. 2,0 (pály. 0,2) MFt]

A protonnyalábos mikromegmunkálás eljárásainak kidolgozása során meghatározták a mikromegmunkálásra eddig nem használt CR-39, és egy kifejlesztés alatt álló új típusú negatív rezisztanyag optimális besugárzási paramétereit. Megvalósították a PIN-diódás töltésmérést és pixelnormalizációt. 50 μm vastag PMMA olvadását tanulmányozva megmérték, hogy különböző áramerősségek esetén mennyi töltés vihető fel a mintára anélkül, hogy az megolvadna. [3 (2) fő, ráford. 9,0 (pály. 0,5) MFt]

Rendszeres sugárkárosodási vizsgálatokat végeztek a CERN LHC CMS kísérlet nyomás-szabályozó elektronikája végleges változatának, valamint az ALICE kísérlet nagysebességű adatátviteli vonalához kifejlesztendő egységek alkatrészeinek kiválasztásához. [5 (5) fő, ráfordítás 6,0 MFt]

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézet valamennyi kutatási területén rendelkezik kiterjedt hazai együttműködési kapcsolatokkal. Ezek közül különösen jelentősek az alábbiak:

- *a részecskefizikai kutatások területén:* a Debreceni Egyetem (DE) TTK Kísérleti Fizikai, valamint Elméleti Fizikai Tanszékei, az MTA RMKI;
- *a magfizikai kutatások és alkalmazásaik területén:* a DE több tanszéke és klinikája, az MTA RMKI, az MTA AEKI, a BME Nukleáris Technikai Intézete;
- *az atomfizikai kutatások és alkalmazásaik területén:* a MTA MFA, a DE TTK Kísérleti Fizikai Tanszéke, a BME Kísérleti Fizikai Tanszéke, a Miskolci Egyetem Fizikai Tanszéke, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, a BIOGAL Rt;
- *a kondenzált rendszerek kutatása területén:* az MTA MFA, a MTA SZFKI, az MTA SZTE Lézerfizikai Kutatócsoportja, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, a DE TTK Szilárdtest-fizikai Tanszéke;

- *a földtudományok és környezetkutatás területén:* a DE, az ELTE és a Miskolci Egyetem több tanszéke, az MTA GKI, a MÁFI, az ELGI, az OKK-OSSKI, a VITUKI, a Paksi Atomerőmű Rt, a püspökszilágyi RHKT Kht, a Mecsekérc Környezetvédelmi Rt;
- *a régészeti kutatások területén:* a Magyar Nemzeti Múzeum és a hazai múzeumi hálózat több intézménye
- *az eszközök és módszerek fejlesztése területén:* a BME Elektronikus Eszközök Tanszéke, az MFA, a DE OEC PET Centruma és a DE TTK Kísérleti Fizikai Tanszéke.

Részvétel a felsőoktatásban

Az intézet 2004-ben megtartotta a felsőoktatásban korábban is betöltött szerepét, a Debreceni Egyetemmel fenntartott hagyományos kapcsolatait. Az ATOMKI 22 kutatója a beszámolási időszakban meghirdetett 13 kurzus keretében 466 tantervi óra megtartásával járult hozzá a Debreceni Egyetemen (DE) folyó oktatáshoz. Egy kurzust és a hozzá tartozó gyakorlatot a Szegedi Tudományegyetemen tartottak meg. A megtartott gyakorlati órák száma 2004-ben 217 volt. A pregraduális képzésben fizikus, fizika tanári, informatikus, környezettan, környezettudományi valamint a környezetgazdálkodási agrármérnök szakon oktattak (előadások, speciális laboratóriumi gyakorlatok, TDK- és diplomamunkák). A beszámolási időszak folyamán 5 PhD és 4 diplomamunkás hallgató, továbbá 1 TDK-s hallgató dolgozott az intézetben, a témavezetésre fordított órák száma összesen 894 volt.

A DE TTK és az ATOMKI közös Környezetfizikai Tanszéke helyileg az ATOMKI területén működik. A tanszék a csökkenő létszámú fizika szakos hallgatók mellett jelentős számú környezettan tanári, valamint környezettudomány szakos hallgató képzésében vesz részt. Változatlanul az intézet területén működik a DE TTK Elméleti Fizikai Tanszéke és az Orvostudományi Centrum pozitronemissziós tomográf (PET) laboratóriuma.

Nemzetközi kapcsolatok

A nemzetközi szervezésű, több intézményre kiterjedő programokban való részvétel, valamint az államközi és az MTA által kötött egyezményekre alapozott együttműködés mellett lényeges szerepet tölt be az intézet nemzetközi kapcsolataiban az intézetközi megállapodásokra alapozott, valamint az alkalmi, informális együttműködés is. Ilyen együttműködések voltak:

- *a magfizika és alkalmazásai körében* 15 ország 32 egyetemével és kutatóintézetével;
- *az atomfizikai kutatások területén* 5 ország 10 kutatóhelyével;
- *a kondenzált anyagok kutatása körében* 13 ország 17 kutatóhelyével;
- *a földtudományok és környezetkutatás területén* 8 ország 14 kutatóhelyével;
- *a műszerek és mérési eljárások fejlesztése körében* 5 ország 8 kutatóhelyével.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az ATOMKI kutatói 2004-ben 19, alvállalkozóként további 6 OTKA pályázati téma kidolgozásában vettek részt. Konzorciumi tagként vagy alvállalkozóként négy NKFP, két OMFB/NKTH és egy IHM pályázat céljainak megvalósításában is részt vettek.

Az intézet 2004-ben 21 több résztvevős nemzetközi, részben pályázati rendszerben szervezett kutatási programban vett részt, amelyek között 4 COST-program, 4 EU-projekt, 4 NAÜ-projekt ill. koordinált kutatási program, 3 CERN-projekt, 1 IGCP-projekt, 5 egyéb több-

résztevős együttműködésre alapozott projekt van. Ehhez járul még az intézet részvétele több sokoldalú nemzetközi együttműködésben, így többek között az EUROBALL, EXOGAM, PANCARDI programokban és a LUNA-II kollaborációban. Egyes kollaborációkhoz számottevően hozzájárult a nemzetközi nagyberendezések igénybevételét lehetővé tevő EU pályázati rendszer (TARI – Transnational Access to major Research Infrastructures). Ennek keretében 6 kooperációs téma kidolgozásához nyert támogatást az intézet 2004-ben. Ez a hozzájárulás az intézet gazdálkodásában nem jelenik meg

12 témában államközi (TÉT) egyezményeken alapuló, pályázati rendszerben támogatott együttműködési kapcsolatok voltak argentin, dél-afrikai, francia, holland, japán, német, osztrák, spanyol és szlovén kutatóhelyekkel (a VIc táblázatban nem szerepelnek a más intézmények által kezelt pénzeszközök felhasználásával folytatott együttműködések). A MTA által kötött egyezményeken alapuló kétoldalú együttműködési kapcsolatok 16 témában bolgár, cseh, egyesült államokbeli, finn, francia, horvátországi, japán, lengyel, német, román valamint szerbiai kutatóintézetekkel és egyetemi kutatóhelyekkel folytatott együttműködésekre terjedtek ki. Mind a TÉT egyezmények, mind az MTA által kötött nemzetközi megállapodások – az általuk biztosított többletforrások szintjétől függetlenül – jelentős mértékben járultak hozzá az intézet nemzetközi kapcsolatainak erősítéséhez. Egyes esetekben az együttműködésnek főhatósági egyezményre alapozott volta elengedhetetlennek bizonyult.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Erdélyi Z, Sladeczek M, Stadler L-M, Zizak I, Langer GA, Kis-Varga M, et al. (8): Transient interface sharpening in miscible alloys, Science 306, 1913-1915 (2004)
2. Nácher E, Algora A, Rubio B, Taín JL, Cano-Ott D, Courtin S, et. al (18): Deformation of the N = Z nucleus ^{76}Sr using beta-decay studies. Phys Rev Letters 92, 2501 (2004)
3. Stolterfoht N, Sulik B: Interferences in electron emission from H₂ induced by fast ion impact. Advances Quantum Chem. 46, 307-327 (2004)
4. Elekes Z, Dombrádi Zs, Krasznahorkay A, ... Csatlós M, ... Fülöp Zs, Gácsi Z, et al. (26): Decoupling of valence neutrons from the core in ^{16}C . PhysLetters B586, 34 (2004)
5. Formicola A, Imbriani H, ... Fülöp Z (11), ... Gyürky Gy (15), ... Somorjai E (26) et al. (32): Astrophysical S(E)-factor of $^{14}\text{N}(p,\gamma)^{15}\text{O}$. Phys Letters B591, 61-68 (2004)
6. Borbély-Kiss I, Kiss ÁZ, Koltay E, Szabó Gy, Bozó L. Saharan dust episodes in Hungarian aerosol: elemental signatures and transport trajectories. J Aerosol Sci 35, 1205-1224 (2004)
7. Stöckl J, Suta T, Ditrói F, Winter HP, Aumayr F: Separation of potential and kinetic electron emission for grazing impact of multiply charged Ar ions on a LiF(001) surface. Phys Rev Letters 93, 3201 (2004)
8. Szántó Zs, Medzihradzky Zs: Holocene environmental changes in Westren Hungary. Radiocarbon 46, 691-699 (2004)

9. Ayan AS, Akchurin N, Akgun U, Anderson EW, ... Fenyvesi A (11), ... Molnar J (22), et al. (41): Results from the beam test of the CMS Forward Quartz Fiber Calorimeter pre-production-prototype (PPP-I), J Physics G: Nucl Particle Phys 30, N33-N44 (2004)
10. Klencsár Z, Németh Z, Vértes A, ... Vad K (9), Mészáros S, Haki J (11): The effect of cation disorder on the structure of Sr₂FeMoO₆ double perovskite. J Magnetism and Magnetic Materials 281, 115 (2004)
11. Seghedi I, Downes H, Szakács A, Mason PRD, ... Pécskay Z (7), et al.(9): Neogene-Quaternary magmatism and geodynamics in the Carpathian-Pannonian region: a synthesis. Lithos 72, 117-146 (2004)
12. Tókési K, Tong XM, Lemell C, Burgdörfer J: Friction force for charged particles at large distances from metal surfaces, Advances Quantum Chem 46, 29-64 (2004)
13. Sankari A, Ricz S, Kövér Á, ... Varga D (5), ... Ricsóka T (7), et al. (9): Angular distribution of Xe 5p spin-orbit components at 100-200 eV photon energies. Phys Rev A69, 012707, 1-4 (2004)
14. Pesic ZD, Chesnel J-Y, Hellhammer R, Sulik B, Stolterfoht N: Fragmentation of H₂O molecules following the interaction with slow, highly charged Ne ions, J. Physics B: At Mol Opt Phys 37, 1405-1417 (2004)
15. Pál KF: Hysteretic optimization. in: New optimization algorithms in physics. Eds.: Hartmann AK, Rieger H. Wiley-VCH Verlag GmbH, 205-226 (2004)
16. Lévai G, Arias JM: The sextic oscillator as a γ -independent potential, Phys Rev C 69, 014304, 1-6 (2004)
17. Nándori I, Jentschura UD, Sailer K, Soff G: Renormalization-group analysis of the generalized sine-Gordon model and of the Coulomb gas for $d > 3$ dimensions. Phys Rev D 69, 5004 (2004)
18. Cseh J, Algora A, Darai J, Hess PO: Deformation dependence of nuclear clusterization, Phys Rev C 70, 034311, 1-8 (2004)
19. Elekes Z, Dombrádi Zs, Saito A, ... Fülöp Zs (7), Gibelin J, et al. (37): Bound excited states in ²⁷F. Phys Letters B 599, 17 (2004)
20. Imai N, Ong HJ, ... Dombrádi Zs, Elekes Z (9), ... Fülöp Zs (11) et al. (40): Anomalously hindered E2 strength B(E2;2+1 \rightarrow 0+) in ¹⁶C. Phys Rev Letters 92, 2501 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Atommagkutató Intézet

Átlagléttség ¹ :	205	Ebből kutató ² :	95
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			21
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			341
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			294
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	227	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	7
nemzetközi együttműködés keretében:	244	SCI által regisztrált folyóiratban:	247
összesített impakt faktor:	567,14	összes hivatkozás száma ⁴ :	695
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			695
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	9 jegyzet: -
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	2 jegyzet: -
Megvédett PhD értekezés:	3	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	129	poszterek száma ⁶ :	101
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	17	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			844 MFt
Beruházási támogatás:	11 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	15
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			29
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	40,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			7
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	19,6 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	46,5 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			14
EU forrásból:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	17,6 MFt
Egyéb:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	31,0 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3,3 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			27,3 MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Atommagkutató Intézet

Ipari együttműködések keretében, szerződéses feladatként ipari körülmények között alkalmazható tömörségvizsgálati eljárást dolgoztak ki. A kifejlesztett eljárások alapján – vállalati közreműködéssel – megvalósítottak és hűtőipari berendezéseket gyártó üzemek gyártósorán üzembe állítottak két, a termékek végellenőrzését szolgáló tömörségvizsgáló berendezést, amelyek kb. egy perces ciklusidővel alkalmasak a végtermék minősítésére. Az üzemi tapasztalatok alapján a módszer eredményesnek és más eljárásokkal versenyképesnek bizonyult.

Egy IKTA-5 pályázat keretében, együttműködve a Debreceni Egyetem OEC PET Centrum munkatársaival kialakítottak és üzembe állítottak egy jelenleg 12 db PC-t tartalmazó számítógép-klasztert. A GRID technológiára alapozott informatikai háttér az orvosi diagnosztikai célú PET, MRI és CT képek gyors feldolgozása mellett a megfelelő szoftverek telepítésével alkalmassá tehető arra is, hogy a rendszer – a Tier-3 szinten lokális centrumként a CERN LCG (LHC Computing Grid) rendszerébe integrálva – részecskefizikai célú kutatásokban is használható legyen.

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

2004-ben az intézet kutatási feladatai sorában kiemelt helyen szerepeltek a hazai természeti környezet változásaihoz és a társadalmi térszerkezet átalakulásához kapcsolódó kutatások, amelyek részben nemzetközi kutatási programokhoz, részben más hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez kötődtek. Ugyancsak fontos feladat volt a Nemzetközi Földrajzi Unió 30. Kongresszusára (Glasgow, 2004. aug.) való felkészülés és ott az intézet legfontosabb kutatási eredményeinek demonstrálása.

A fentieknek megfelelően a súlyponti feladatokat az intézet számára a következő kutatási programok önálló, ill. együttműködésben való művelése jelentette: „A globális klímaváltozás természetföldrajzi hatásai: az aridifikáció vizsgálata a Duna-Tisza közén” c. KAC projekt; a „Talaj- és felszíni vízvédő minimális talajművelési tevékenység alkalmazásával Észak- és Közép-Európában” c. EU-LIFE projekt; „Az árkos erózió és a környezeti tényezők közötti kapcsolat összehasonlító vizsgálata Magyarországon és Dél-Afrikában és az ellene való védekezés” c. DAK projekt a TÉT Alapítvány által koordinált bilaterális együttműködés keretében, továbbá „A lineáris erózió domborzatformáló és környezetalakító szerepe Magyarországon” c. FVM projekt, amelyet az ELTE természetföldrajzi tanszékével közösen műveltek.

Tovább folytatták a gazdasági tevékenység során keletkező veszélyes hulladékok lerakására és biztonságos elhelyezésére alkalmas területek komplex földtudományi vizsgálatait. Ennek keretében a talajerózió és a vízbeszivárgás pontosabb meghatározása céljából környezeti monitoring mérések végzése szerepelt a legfőbb feladatok között Püspökszilágy, Bataapáti és Boda települések térségében.

Az intézet természetföldrajzi kutatásai között ugyancsak kiemelkedő jelentőségű volt a 2003-ban megindított, angol–magyar együttműködésben folyó EU-LIFE projekt SOWAP (Soil and Surface Water Protection) alprogramja, amely elsősorban közép-európai mintaterületek kutatását célozza.

Nemzetközi érdeklődést kiváltó felszínalaktani vizsgálatokat kezdtek a NASA-tól kapott Mars-fényképek kiértékelésével a bolygó felszíni változásaira vonatkozóan, különös tekintettel a víz egykori jelenlétének kimutatására.

A társadalomföldrajzi kutatások között 2004-ben a kiemelt feladatok között szerepeltek a következő témák: A városrehabilitáció és a bérlakás-programok hatása a lakásmobilitásra; A korszerű iparágak magyarországi megjelenésének térszerkezeti összefüggései; A magyarországi lakáspiac átalakulásának földrajzi jellemzői; A magyarországi modern turizmus földrajza; A mobilkommunikációs szolgáltatások fejlődésének földrajzi sajátosságai Magyarországon.

2004-ben is folytatódtak az EU-5 keretprogramhoz kapcsolódó kutatások, így a városi zöldterületek rehabilitációját szolgáló URGE projekt, a szomszédsági területek közötti migrációs folyamatokat feltáró NEHOM projekt, továbbá a NKFP-5 projekt keretében jelentős kutatási feladatként jelentkezett a Kárpát-medencei magyar települések és régiók térszerkezeti fejlődésének vizsgálata. Ugyancsak az NKFP-5 keretében folytattak kutatásokat a Magyarországot érintő nemzetközi vándorlások területi sajátosságainak feltárására.

Fontos természet- és társadalomföldrajzi kutatómunkát egyaránt igénylő feladatként jelentkezett Magyarország 1991-ben megjelent kistájkataszterének átdolgozása és kibővítése, a munkálatok első részének megindítása. Ugyancsak a két tudományterület együttműködésében megvalósítandó feladat volt a Tisza-völgy árvíz által veszélyeztetett süllyedék-területeire vonatkozó átfogó természet- és társadalomföldrajzi kutatások folytatása.

Etnikai földrajzi kutatásaik jelentős 2004. évi feladata volt a Vajdaság mai etnikai térképének elkészítése és megjelentetése, továbbá a Muravidék, az Örvidék és Burgenland etnikai térképének tartalmi összeállítása a 2002-ben elnyert NKFP-5 program keretében.

Komplex történeti, etnikai és gazdaságföldrajzi kutatómunkát igénylő feladatként jelentkezett az intézet számára a Délkelet-Európa országait feldolgozó tematikus térképsorozat elkészítése az MTA elnökségének megbízása alapján az Európai Unió felkérésére.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

A lineáris erózió domborzatformáló szerepéhez kapcsolódó mintaterületi vizsgálataikkal (Somogytúr, Orci-völgy) kimutatták a területekre vonatkozóan a vízmosások fejlődési trendjét, majd az így kapott eredményeket alapul véve kidolgozták az eróziós folyamatok hosszú távra extrapolációját lehetővé tevő digitális domborzatmodellt (DDM). A DDM segítségével lehetőség nyílt az 1984. évi állapotokkal való összehasonlítás elvégzésére, a folyamat méretének, tér- és időbeni változásainak értékelő elemzésére. Jelentős módszertani újdonság a mintaterület völgyeiben elhelyezkedő vízmosások GPS segítségével történő felvételezése és az így nyert adatok számítógépes feldolgozása.

Kutatásban résztvevők száma: 6 fő, ebből intézeti: 4 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 1,1 mFt, ebből pályázati forrás: 0,8 mFt

Eredmény hasznosíthatósága: Az eróziós folyamatok sajátosságainak mélyebb megismerése segíti a talajvédelem hatékonyságának növelését.

A Püspökszilágy és Boda melletti eróziós parcellán végzett vizsgálatok alapján megállapították, hogy a fedetlen lejtőhordalék talajon mért hordalékszállítási átlag 18 gramm/liter, ugyanez az érték gyepvel fedett barna erdőtalajon 4,8 gramm/liter. Megállapították, hogy a vizsgált talajok és lejtéviszonyok esetében az aktuális területhasznosítás és növényzet mellett a felületi rétegerózió általi veszélyeztetettség fedetlen vagy szántóföldi művelésű területeken jelentős is lehet.

Kutatásban résztvevők száma: 18 fő, ebből intézeti: 6 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 2,2 mFt, ebből pályázati forrás: 0,4 mFt

Eredmény használhatósága: A leendő lerakóhely környezetbiztonságát segíti elő, hosszú távon biztosítva a környékbeli lakosság sugárvédelmét.

A SOWAP projekthez kapcsolódóan kiépített kísérleti parcellarendszeren végzett összehasonlító vizsgálataikkal egyértelműen igazolták a környezetkímélő mezőgazdaság kedvező természetföldrajzi és ökológiai hatásait. A 107 ha-os mintaterületen fele-fele arányban alkalmaztak hagyományos, ill. környezetkímélő talajművelési módot. Kutatásaik bebizonyították, hogy a talajkímélő művelés alá vont parcellákon közel azonos költségigénnyel és azonos nagyságrendű terméseredmények érhetők el, mint a hagyományosokon, emellett pozitív hozadékként fennmarad a terület ökológiai egyensúlyhoz közeli állapota (pl. változatos madárvilág).

Kutatásban résztvevők száma: 7 fő, ebből intézeti: 4 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 1,8 mFt, ebből pályázati forrás: 0,8 mFt

Eredmény hasznosíthatósága: Elősegíti a környezetkímélő agrártevékenység térhódítását, a mezőgazdasági földek minőségének és mennyiségének megőrzését.

A társadalom- és gazdaságföldrajzi kutatások keretében elkészült a „Délkelet-Európa térképekben” c. tematikus atlaszmű, amely során elvégezték a térség földrajzi lehatárolását, áttekintették a makrorégió államhatalmi térfelosztásának, etnikai és vallási térszerkezetének, urbanizációs folyamatainak, gazdasági életének, közlekedési infrastruktúrájának és idegenforgalmi adottságainak 20. századi alakulását.

Kutatásban résztvevők száma: 8 fő, ebből intézeti: 8 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 6,9 mFt, ebből akadémiai forrás: 5,8 mFt

Eredmény hasznosíthatósága: Az EU politikai döntéshozók gazdag szakinformációs anyaggal való ellátása a csatlakozásra készülő délkelet-európai országokat magába foglaló nagytérségről. Az atlasz a felsőoktatásban is jól használható.

Turizmusföldrajzi vizsgálatok keretében lezárták „A bevásárló turizmus regionális különbségei Magyarországon” c. OTKA kutatási programot, amelyben meghatározták a bevásárló-turizmusban leginkább érintett részben nagyváros közeli, részben országhatár menti régiókat. Elemezték e speciális idegenforgalomhoz kötődő tevékenység térszerkezeti és társadalom földrajzi sajátosságait, feltárva a jelenség kialakulásában szerepet játszó társadalmi és gazdasági tényezőket.

Kutatásban résztvevők száma: 3 fő, ebből intézeti: 2 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 1,2 mFt, ebből pályázati forrás: 0,8 mFt

Eredmény hasznosíthatósága: Határmenti térségek idegenforgalmi fejlődését előmozdítja.

Az etnikai földrajzi kutatásaik során 2004-ben elkészítették a Vajdaság mai területének etnikai térkép rendszerét, elvégezték a térség közép- és újkori etnikai térszerkezet rekonstruálását. Megtörtént a Kárpát-medence kisebbségi magyarok által lakott területeire vonatkozólag a táj-, régióbeosztással kapcsolatos hazai szakirodalom áttekintése, feldolgozása. A kisebbségi magyar települések és régiók etnodemográfiai, kutatástörténeti, nyelvészeti és néprajzi adatbázisának kialakítása részfeladat során a Kárpát-medencei magyarlakta települések közül a kárpátaljai

(ukrajnai), vajdasági (szerbiai), horvátországi, muravidéki (szlovéniai) és örvidéki (ausztriai) területre vonatkozólag elkészítették a vizsgált települések adatbázisát. Elemezték a recens etnikai térfolyamatokat, ezek eredményeit részletes térképeken mutatták be.

Kutatásban résztvevők száma: 6 fő, ebből intézeti: 4 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 3,2 mFt, ebből pályázati forrás: 1,8 mFt

Eredmény hasznosíthatósága: Etnikai földrajz felsőfokú oktatásában, határon túli magyarság és az anyaország közötti együttműködés javításában.

Egyéb bemutatható eredmények

Hazai és külföldi egyetemek, akadémiai kutatóhelyek együttműködésében, továbbá kartográfus szakemberek közreműködésével került sor „Regional Studies on Loess (Loess Inform 4.) nemzetközi kiadvány összeállítására és megjelentetésére.

Egyetemi és intézeti kooperációban készítették el és adták ki a „Táj és környezet” c. tanulmánykötetet, amely az egyes szaktudományok szempontjából ad összefoglaló áttekintést a táj kutatás legújabb elméleti és legfrissebb Kárpát-medencebeli, ill. hazai eredményeiről, elősegítve a környezetbarát regionális fejlesztési politikák földtudományi és tájökölógiai megalapozását.

A Nemzetközi Földrajzi Unió (IGU) 2004. évi konferenciája tiszteletére megjelentették a Földrajzi Értesítő angol nyelvű különszámát az elmúlt 10 év legjelentősebb kutatási eredményeit tartalmazó tanulmányokkal.

Tovább folytatódott az Aquincum római kori környezetének rekonstrukcióját célzó kutatás óbudai római kori települések környezetgeomorfológiai szempontú vizsgálatával a Aquincumi Múzeummal való együttműködés keretében .

Intézeti kezdeményezéssel jelentős hazai és nemzetközi érdeklődést keltő geomorfológiai vizsgálat-sorozatot kezdtek a Mars bolygó felszínén lejátszódott felszínfejlődési folyamatok tanulmányozására a NASA-tól kapott Mars-fényképek kiértékelésével, a víz egykori jelenlétének felderítése céljából.

A légi balesetek elleni védetség szintjének meghatározása céljából átfogó vizsgálatokat végeztek a Paksi Atomerőmű 50 km-es körzetére vonatkozóan a polgári és katonai célú légtérhasználat sajátosságaira, továbbá a légi balesetek bekövetkezési valószínűségének megállapítására vonatkozóan (az ERŐTERV Rt. felkérésére).

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézet a 2004. év során is sokoldalú és gyümölcsöző együttműködést folytatott az MTA földtudományi intézeteivel (GKL-lel és GGKI-vel), emellett az MTA egyéb rokontudományi intézetei közül az RKK-val, a Kisebbségkutató Intézettel, a Botanikai Kutatóintézettel, a Szociológiai Kutatóintézettel és a különféle szaktárcák kutatóhelyeivel (MÁFI, OSSKI, OMSZ, VÁTI, KTI, VITUKI stb.).

Számos országos jelentőségű kutatásban vettek részt, amelyet a Miniszterelnöki Hivatal Nemzeti Területfejlesztési Hivatala, a HTMH, továbbá különböző minisztériumok, (GKM, KTM, OM, KüM), ill. más országos hatáskörű szervek (ÁNTSZ, HTMM, KSH) indítottak, ill. koordináltak. Az egyes egyetemek földrajzi, ill. földtudományi tanszékeivel közösen művelt kutatási témacsoportok, témák együttes száma meghaladta a 15-öt.

2004-ben is széles körű volt felsőoktatási tevékenységük. Számos felsőoktatási intézményben végeztek oktatási félállású oktatóként, ill. óraadóként. A legszorosabb kapcsolata az intézet kutatóinak az egyetemekkel volt (ELTE, PTE, DE, SZTE, PPKE, VE, NYME, ME, SZIE), de a főiskolák (BGYTF, KJF, BGF, MÜTF) geográfus szakember képzésében is tevékenyen részt vettek. Egy vezető kutatójuk a PPKE-n dékánhelyettesi funkciót tölt be, két kutatójuk főiskolai tanári címet szerzett.

Az intézet munkatársai közül 2004-ben is 10-en folytattak felsőoktatási tevékenységet, amelyek során a következő tantárgyakat oktatták:

- Ázsia földrajza
- Magyarország geomorfológiája
- Földrajzi modellezés a térinformatikában
- Tájökológia, tájvédelem
- Tájföldrajz
- Tájtan
- Természet- és környezetvédelmi menedzsment
- Modellezés a természetföldrajzban
- Általános gazdaságföldrajz
- Magyarország földrajza
- Etnikai, vallási és politikai földrajz
- Általános népesség- és településföldrajz
- A Kárpát-medence etnikai és
- Európa természeti földrajza
- Általános településföldrajz
- Településtudomány
- Politikai földrajz
- A turizmus földrajza
- A városfejlődés elméleti és módszertani kérdései
- Közlekedési és távközlési földrajz
- Szociálgeográfia
- Magyarország politikai földrajza

2004-ben is aktív oktatási tevékenység folyt az ELTE-nek az intézethez kihelyezett Alkalmazott Földrajzi Tanszéki Csoportjában, amelynek 8 éve ad otthont az FKI. 2004-ben 11 kutatójuk kapcsolódott be a hazai geográfus hallgatók PhD képzésébe, ill. egyetemi diplomamunkák irányításába. 9 kutató véleményezett felsőoktatási és akadémiai pályázati munkákat, PhD dolgozatokat, diplomamunkákat. 8 munkatársuk vezetett terepgyakorlatokat hazai és külföldi egyetemi hallgatói csoportok részére, 7 fiatal kutató végzi az ELTE, ill. a

PTE doktoriskoláját. 1 tudományos munkatársuk PhD fokozatot szerzett. Az intézet igazgatóját a Szent István Akadémia rendes tagjává választotta.

A beszámolási évben 16 kutatójuk összesen 67 előadást tartott, ebből 30-at nemzetközi tudományos rendezvényeken. A hazai tudományos események közül kiemelkednek a Földtudományi Kutatóközpont februári akadémiai beszámoló ülésén, a II. Szegedi Földrajzi Konferencián, továbbá a novemberi Intézeti Tudományos Napon rendezett konferencián elhangzott előadások, illetve kiállított poszterek. Az intézet kutatói közül 2004-ben ketten voltak Széchenyi Professzori Ösztöndíjasok. Egy főmunkatársuk az MTA Földrajzi Tudományos Bizottságának elnökhelyettesi feladatait látja el.

Az intézet 2004-ben is nagy figyelmet fordított meglévő sokoldalú *nemzetközi kapcsolatainak* ápolására és bővítésére. Ennek keretében törekedett minél több EU projektbe (köztük az EU-6 keretprogramba) való bekapcsolódásra és a nemzetközi pályázatokon való sikeres szereplésre, kihasználva kutatógárdája széles nemzetközi kapcsolatait. A tárgyévben 2 DAAD ösztöndíjas kutatójuk volt.

A 2004 folyamán szervezett tudományos rendezvények közül az intézetben került lebonyolításra az ESSC (European Society for Soil Conservation) 4. kongresszusa, az EU-5 égisze alatt folyó NEHOM Workshopok harmadik negyedévi értekezlete, a Soil Erosion and Global Change EU-projekt koordinációs tanácskozása.

Ugyancsak az FKI-ban rendezték meg 2004-ben két professzort köszöntő tudományos konferenciákat.

A külföldi tudományos rendezvények közül az intézet kutatói a következőkön szerepeltek előadással, korreferátumokkal, ill. konzulensként: Nemzetközi Földrajzi Unió 30. Kongresszusa (Glasgow), a 4th International Conference on Land Degradation (Cartagena), az EU-5 keretprogramhoz tartozó Housing Growth and Regeneration ENHR Konferencia (Cambridge), Warsaw Regional Forum 2004 Konferencia (Varsó), AAG Centennial Conference (Philadelphia, USA), Conference on Sustainable Development and Natural Resources (Varanasi, India), Arbeitskreis Wohnungsmarktforschung DGG Konferencia (Zittau), RRC-NETHUR Közös Konferencia (Utrecht). IGU Pre Conference Meeting Geography of Leisure and Tourism (Loch Lomond). Emellett az intézet kutatói részt vettek a COST ACTION 629 izlandi, belgiumi (Brüsszel) és ausztriai (Bécs) konferenciáján, a SOWAP leuveni és stanfordi ülésén.

A Kárpát-medence magyarlakta településeinek térszerkezeti problémáival foglalkozó kutatóik Ljubljánban, Alsólendván, Dubrovnikban és Komárnóban konferenciákon, tanácskozásokon, workshopokon szerepeltek. A szintén EU-5 alá tartozó NEHOM workshopokon (Tallin, Berlin), és URGE konferenciákon (Zittau, Amszterdam, Drezda) is előadással szerepeltek kutatóik.

2004-ben az intézet nemzetközi kapcsolatai különösen szorosak voltak a Horvát, a Szlovén, a Szlovák, a Román Tudományos Akadémiával, a németországi Siebenbürgen Intituttal (Neckar), a lipcsei Institut für Länderkunde-val, továbbá a zágrábi, a müncheni (TU), a helsinki, a berlini, a bergeni, a velencei és a római egyetemekkel. E kapcsolatok számos vonatkozásban kötődnek az említett nemzetközi együttműködésben folyó kutatásokhoz, ill.

különböző fajta kétoldalú tudományos együttműködésekhez. 2003-ban is bővültek az intézet nemzetközi kapcsolatai berni és londoni egyetemekkel.

Kutatóik 2004-ben is több vendégkutató magyarországi szakmai programját szervezték és külföldi egyetemi csoportok magyarországi tanulmányútját vezették, elsősorban Németországból, Finnországból, Svájcban, Olaszországból, valamint Romániából és a Kárpát-medence felsőoktatási intézményeiből (Komárno, Dunaszerdahely, Királyhelmecek).

6 munkatársuk vesz részt hosszabb ideje bizottsági tagként nemzetközi tudományos szervezetek munkájában, 4 fő nemzetközi földrajzi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja. A Természetföldrajzi Osztály vezetője az ESSC alelnöke, egyben az IGU Magyar Nemzeti Bizottságának elnöke. Az intézet igazgatója az INQUA Magyar Tagozatának elnöke. 2004-ben 3 kutatójuk vett részt hosszabb idejű külföldi tanulmányúton (India, Németország, Ausztria), 1 fiatal kutató kapott külföldi ösztöndíjat (Németország). Az intézet kutatóinak idegen nyelvű tanulmányai 7 külföldi szakfolyóiratban és számos konferencia kiadványban jelentek meg.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2004-ben öt OTKA pályázatot nyertek a következő témakörökben: Korszerű iparágak magyarországi megjelenésének térszerkezeti összefüggései, A dél-dunántúli német kisebbség etnikai földrajza, Magyarország modern turizmusföldrajza, Magyarország kistájainak katasztere, A Kisalföld térszerkezetének történelmi változásai.

A korábban elnyert hazai pályázatok között jelentős arányban voltak jelen 2004-ben is az OTKA pályázatok (a művelt témák száma: 13), továbbá egy NKFP projekt. Az intézet sikerrel folytatta a Boda község mellett létesítendő felszín alatti radioaktív-hulladék tározó környezetének kutatásához kapcsolódó feladatokat átfogó geomorfológiai, geoökológiai, hidrogeográfiai és földhasználati, valamint talajeróziós vizsgálatok harmadik ütemében. Ennek keretében mintaterületek geomorfológiai és geoökológiai kutatása folyt a tárolóhely környezetének legérzékenyebb részeire vonatkozóan.

Ugyancsak a korábbi sikeres kutatási eredmények révén nyerte el az intézet a püspökszilágyi RHFT kiegészítő földtani kutatására vonatkozó megbízást, amelynek keretében 2004-ben talajállapot-felvételező és talajmonitoring vizsgálatok folytak a veszélyes hulladék-lerakóhely környezetében, több egyetemi és ágazati kutatóhellyel (Mecsekérc Rt, Erőterv Rt, PTE, OSSKI, OKK, KTI stb.) együttműködésben.

Sikeresen zárult le az MTA Elnöksége által meghirdetett, Délkelet-Európa gazdasági társadalmi térszerkezetének átfogó elemzését célzó téma művelése, amelynek eredményként tematikus térképsorozatot jelentettek meg a térségről magyar és angol nyelven, szöveges elemzésekkel kiegészítve.

A hatékonyabb árvízvédelmet szolgáló, több éve folyó Tisza-projekt (elnyert pályázat) keretében folytatták a leendő tározóterek céljára kiválasztott mintaterületeken (Bodrogköz, Tiszazug, Szolnok és Csongrád térsége) a felszín-fejlődés lokális elemeinek vizsgálatát és geoökológiai térképezésüket az eredményesebb vízgazdálkodás megvalósítása szempontjából.

2004-ben további nemzetközi pályázatokat nyújtottak be az INTERREG III/B CADSES keretében (GreenKeys Project), továbbá 2 DFG projektet „Revitalisierung von gründerzeitlichen Altbauwohnquartieren in Budapest” és „Zwischen Gentrification und Abwärtspirale” c. témakörökben.

Folytatták a víz, mint természeti erőforrás környezetkímélő hasznosítását célzó ECO–GEOWATER projekt, továbbá a New-EU-Borders c. EU-6 keretprogram 7. Prioritásaként művelt New form of Governance and Citizenship projekt. Újabb eredményeik születtek az EU-5 keretprogramba tartozó, az európai nagyvárosok hanyatló városrészeinek társadalmi rehabilitációjával foglalkozó NEHOM program, valamint a nagyvárosi zöldterületek fenntartási és fejlesztési lehetőségeit kutató URGE projekt keretében.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Burdack J, Dövényi Z, Kovács Z: Am Rand von Budapest – Die Metropolitane Peripherie zwischen nachholender Entwicklung und eigenem Weg. Petermanns Geographische Mitteilungen. 148/3. 30-39 (2004)
2. Farkas J, Kovács Z, Székely G: A magyar lakáspiac területi jellemzői az ezredfordulón / írták Farkas J, Kovács Z, Székely G. Bp.: Központi Statisztikai Hivatal ; MTA FKI. 169 p. (2004)
3. Juhász Á: Az aktuálgeomorfológiai térképezés a tájrehabilitáció és a településfejlesztés gyakorlatában. In: Táj és környezet : / szerk.: Dövényi Z, Schweitzer F. Bp. : MTA FKI, 163–187 (2004)
4. Kertész Á: Az egyik legfontosabb recens felszínalakító folyamat, a talajpusztulás Magyarországon. In: A magyar földrajz kurrens eredményei : Földrajzi Konferencia 2004. szeptember 2-4. Szeged. Cikkgyűjtemény. Szerk. Barton G.-Dormány G. SZTE TTK Természeti Földrajzi és Geoinformatikai Tanszék, Szeged. (2004)
5. Kocsis K: Changing Ethnic Patterns in the Carpatho-Pannonian Region (1989–2002), In: Szarka L. (Ed.) Hungary and the Hungarian Minorities (Trends in the Past and in Our Time) Atlantic Research and Publications, Inc. Highland Lakes, New Jersey, 36-63. (Atlantic Studies in Society on Change Nr. 122) (2004)
6. Kocsis K, Bottlik Zs: Die Romafrage in der Karpatho-Pannonischen Region == Europa Regional. 12/3. 132–140. (2004)
7. Kocsis K, Kicošev S: A Vajdaság mai területének etnikai térképe = Etnichka karta danashjne teritorijhe Vojvodine = Ethnic map of present territory of Vojvodina : M.a. 1:350 000 / szerző Kocsis K, Kicošev S; számítógépes térképszerkesztés Farkas Z, Keresztesi Z. Bp. : MTA FKK FKI ; MTA Kisebbségkutató Intézet, 2004. – 80x114 cm. – Hátoldalán: A népesség változó etnikai arculata a Vajdaság mai területén = The changing ethnic patterns on the present-day territory of Vojvodina / Kocsis Károly, Saša Kicošev – Főtérképek: 2001, 1941. Melléktérképek: 1495, 1784, 1880, 1910, 1931, 1941, 1991, 2002.
8. Kovács Z, Wiessner R: Budapest – Restructuring a European Metropolis. Europa Regional. 12. 4. pp. 22-31. (2004)

9. Michalkó G: A bevásárlóturizmus / Michalkó G. – Székesfehérvár : Kodolányi János Főiskola, 2004. – 104 p. : ill. ; 24 cm. – (A turizmus termékei, ISSN nincs ; 1.).
10. Regional studies on loess : in memoriam Márton Pécsi (1923–2003) / ed. by Éva Kis. – Bp. : Geographical Research Institute of H.A.S., 2004. – 110 p. : ill. ; 24 cm. – (Loess inform, ISSN 0238–065X ; 4.). – Pécsi's publications on loess: a selected bibliography 9–10. p.
11. Schweitzer Ferenc: Magyarország hulladékgazdálkodási helyzete. – In: Táj és környezet : / szerk.: Dövényi Zoltán, Schweitzer Ferenc. – Bp.: MTA FKI, 191–202. (2004)
12. Táj és környezet : / szerk.: Dövényi Zoltán, Schweitzer Ferenc. – Bp. : MTA FKI,. – 377 p. ill.; 25 cm. (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Földtudományi Kutatóközpont, Földrajztudományi Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	46	Ebből kutató ² :	27
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			10
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			85
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			70
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	4	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	5
nemzetközi együttműködés keretében:	-	SCI által regisztrált folyóiratban:	1
összesített impakt faktor:	1,057	összes hivatkozás száma ⁴ :	204
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			204
Megjelent könyv:	7	könyvfejezet:	10
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	4	könyvfejezet:	19
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	30	poszterek száma ⁶ :	16
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			9
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			197 MFt
Beruházási támogatás:	1 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	4
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			13
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			19
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	100,1 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			- MFt

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A tevékenység döntő részét jelentik a geodézia, a geofizika és a szeizmológia területéhez tartozó alapkutatások végzése, az ezekhez szorosan kapcsolódó terepi és laboratóriumi munkák folytatása, a terepi és a laboratóriumi megfigyelések adatainak tudományos feldolgozása, értelmezése és közzététele. Az intézet feladatát képezi továbbá a szakterület módszereinek (elméleti és gyakorlati), vizsgálati eszközeinek (műszerek) fejlesztése, létrehozása. Az intézet feladata az országos szeizmológiai hálózat működtetése és fejlesztése, tematikájának következtében szükséges szeizmológiai, földmágneses, ionosféra és geo-dinamikai obszervatóriumok, obszervatóriumi hálózatok működtetése, adatok gyűjtése, regisztrálása.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Geodéziai Főosztály

Obszervatóriumi és terepi geodinamikai megfigyelések, a megfigyelések technikájának és metodikájának fejlesztése (A kutatásokban 8 kutató vett részt, a rendelkezésre álló pénzkeret 5 millió forint volt, melynek nagyobbik fele pályázati forrásokból származott.)

Üzemeltették a Sopronbánfalvi Geodinamikai Obszervatóriumot. Továbbfejlesztették az obszervatórium adatgyűjtő rendszerét, amely percenkénti adatregisztrálást tesz lehetővé. A mért extenzométeres, gravitációs és mikrobarográf adatokat folyamatosan feldolgozzák és értelmezik.

Elemezték a mikrobarográfal 1991-2003 között regisztrált légnyomás adatokat, amelyekből olyan hullámokat is ki tudtak mutatni, amelyeket korábban nem lehetett. Ezzel bebizonyították, hogy az intézetben kifejlesztett mikrobarográf a Föld forgásával kapcsolatos geodinamikai jelenségek és az atmoszféra állapota közötti kapcsolatok vizsgálatára is alkalmas lehet.

Nemzetközi együttműködés keretében vizsgálták a környezeti paraméterek változásainak a geodinamikai mérésekre gyakorolt hatását. Egy felszíni és egy mély obszervatórium adatsorainak vizsgálatával és összehasonlításával továbbfejlesztették a hőmérséklet és a légnyomás hatásainak kiküszöbölésére szolgáló korrekciós eljárásokat. Ezzel hozzájárultak a hazánk területén végbemenő tektonikai mozgások pontosabb meghatározásához.

Az EU5 OASYS projekt keretében mozgásvizsgálati méréseket végeztek a dunaföldvári magasparton. Először mutatták ki a magaspart mozgásai és a Duna vízállása közötti kapcsolatot. A dunaföldvári és másik négy külföldi teszterületen kapott mérési eredményeket egy földcsuszamlásokat előrejelző korai riasztórendszer kifejlesztéséhez használják fel.

Az EU5 SAMCO projekt keretében foglalkoztak objektumok (ipari létesítmények, épületek)

deformáció és mozgásvizsgálati kérdéseivel. Olyan új mérési eljárásokat dolgoztak ki, amelyek lehetővé tehetik magas épületek, nagy létesítmények szerkezeti, „egészségi” állapotának becslését természetes jelenségek által előidézett mozgásainak és deformációinak mérése alapján.

Elméleti eredmények (A kutatásban résztvevők száma hét fő volt, a rendelkezésre álló pénzkeret mintegy 4 millió forintot tett ki, mely 50%-ban pályázati pénzekből eredt.)

A darmstadti egyetem Fizikai Geodéziai Intézetével közösen új modelleket dolgoztak ki az IERS 1995-1998 évek pólus-koordináta adatsora és az intézet nagycenki obszervatóriumának Schumann-rezonancia időszora közötti korrelációs számításra - különös tekintettel a trend-leválasztásra.

Geodinamikai modellek analizálására szolgáló matematikai módszerek kidolgozásával foglalkoztak. A modellekben előforduló idősorok trendjét 3. fokú spline függvényekkel modellezték. Az interpoláció során a szakaszonként egymáshoz csatlakozó rész-intervallumok végpontjában adott második deriváltakkal rendelkező pontok spline típusú interpolációjára új összefüggéseket vezettek le.

A Gauss-Jacobi kombinatorikus kiegyenlítőszámítási elv alkalmazásával speciális geodéziai transzformációs feladatok megoldására analitikus levezetést adtak meg, amely tétel bizonyítja, hogy a kombinatorikus megoldás egybeesik a lineáris Gauss-Markov modell megoldásával.

Összehasonlították a 7 paraméteres dátum transzformációs problémának a linearizált legkisebb négyzetek módszerével nyerhető, és a nemlineáris Gauss-Jacobi kombinatorikus eljárásból származtatott megoldását. Eredményül az adódott, hogy mindkét módszer azonos nagyságrendű residúókat szolgáltat, de a nemlineáris algoritmus numerikusan stabilabb, mint a hagyományos eljárás.

Statisztikai hipotézisvizsgálatok elvégzésével kimutatták, hogy a 7 paraméteres dátum transzformációs probléma megoldásának nemlineáris eljárása alkalmasabb durvahibák szűrésére, mint a linearizált legkisebb négyzetek módszere.

Új algoritmust adtak meg a 3D transzformáció 7 paraméteres nemlineáris egyenlet-rendszerének megoldására a forgatási matrix parametrizálásával, amely eljárás sem nem iteratív, sem nem követeli meg a megfigyelési egyenletek linearizálását. Kimutatták, hogy linearizálásra csak a nemlineáris variancia-covariancia matrix meghatározásához van szükség.

Nemlineáris geodéziai problémák megoldási algoritmusainak kidolgozásához tanulmányozták a Gröbner bázisra való áttérés elméletét, és a 3D transzformáció skála paraméterének számolásához – ellenőrzésképp – levezették a negyed-fokú polinom-egyenletet.

A szakirodalomban tárgyalt túlhatározott 7 paraméteres 3D hasonlósági transzformáció L2 normás megoldásának algoritmusát tovább finomították, és újabb pontosság-növekedést értek el az L1 normás megoldási algoritmus fejlesztésével is.

Mérési adatokon alapuló szimulációs kísérletekkel kimutatták, hogy a Gauss-Listing és a Stokes-Helmert-féle geoid definíciók között már igen kis távolságon (2 km) és mérsékelt változékonyságú nehézségi térben is jelentős (2 cm), szisztematikus eltérés mutatkozik. Ezt figyelembe kell venni a geoid definíciók alapján meghatározott geoid megoldások (GPS/szintezési és gravimetriai) összehasonlításában ha centiméteres, vagy annál jobb (szubcentiméteres) megbízhatóságra van szükség.

Nehézségi adatok inverziójára kidolgoztak egy félautomatikus eljárást, melynek segítségével egy szelvény mentén nagy térbeli pontossággal megállapíthatók azok a jellemző pontok, ahol

a horizontális sűrűség változás szignifikáns. Ezzel a szelvény menti inverzió eredménye robusztusítható és a kőzetblokkok határai könnyebben azonosíthatók.

A Szeizmológiai Főosztállyal közösen végzett kutatómunka eredménye (A kutatómunkában a két főosztály 3 kutatója vett részt, pénzügyi fedezetül egy OTKA projekt szolgált.)

Folytatták a földrengésekkel kapcsolatos térinformatikai adatrendszer továbbfejlesztését. A következő új rétegek kerültek be a rendszerbe: makro- és mikroszeizmikus földrengés-epicentrum térkép, Magyarország geomorfológiai térképe, Magyarország pannonnál idősebb képződményeinek törésrendszer térképe, a Pannon-medence neogén tektonikai térképe, a Mohorovičić-diszkontinuitás mélységtérképe, a felső és alsó pannóniai képződmények talpmélység térképe.

Makroszeizmikus földrengés-epicentrum térképet készítettek a Jámbor et al. (1999) *Kinematikai és Földrengés Epicentrumok térképe* című, munka alapján, amelyet a földrengés-katalógusok, a szöveges leírások, a földrengés-kérdőívek, illetve a bulletinek átnézésével átdolgoztak, pontosítottak és kiegészítettek az 1985-től 2003 évvel bezárólag makroszeizmikusan is észlelt rengésekkel.

Folytatták a földrengések geo-környezeti információit tartalmazó GIS fejlesztését. Szám szerint 9 új réteggel bővült a rendszer. Az elkészült térinformációs rendszer elemzésével sikerült kimutatniuk, hogy a hazai, makroszeizmikusan is érzékelhető rengéseink az átlagos epicentrum-sűrűségnél sűrűbben helyezkednek el a harmadidőszaki medence-aljzat meredek, nagy lejtésű (20°-40°) részeinek környezetében, illetve, hogy számos rengés túlnyomós rétegek közelében található.

Összegyűjtötték a hazánk területén keletkezett rengések különböző szerzők által meghatározott fészekmélység-adatait, azokat kritikusán értékelték, majd meghatározták a földrengés-magnitúdó, epicentrális intenzitás és fészekmélység között kapcsolatot teremtő egyenlet paramétereit speciálisan hazánk területére vonatkozólag.

Geofizikai Főosztály

Obszervatóriumi tevékenység (A téma vitelében 8 fő vett részt. A költségek- 6.5 millió Ft- fele részben költségvetési, felerészben pályázati forrásból származtak.)

A Széchenyi István Geofizikai Obszervatórium a világ elektromágneses obszervatóriumi hálózatának sokrétű tevékenységgel jellemezhető tagja. Mivel a globális éghajlatváltozás okának kutatása egyre inkább a napszél és a földi mágneses tér közötti energiacsatlás megértésére irányul, ennek köszönhetően erőteljesen megnövekedett a nagycentri obszervatórium adatsorai iránti igény, és különféle amerikai és EU pályázati lehetőségek nyíltak meg (Living with a Star, E-STAR, COST, Space Weather, SWENET, SWWT).

Űridőjárás-, űrklíma- és aeronómiai kutatások, amelynek társadalmi haszna a globális klímaváltozás okainak jobb megértése lehet (Résztevők: 5 kutató és 4 segéderő. A pénzügyi forrás 80%-ban pályázati és megbízási forrásokból származott.)

A nagyléptékű magnetoszférikus áramrendszerek topológiájának vizsgálata céljából különféle paleomagnetoszféra scenáriókra végeztek numerikus magneto-hidradinamikus modellezést. Ekvatoriális dipól magnetoszféra esetén a kialakuló magnetoszférának drasztikus jellegű napi változásai vannak; elemezték ennek következményeit.

A magnetoszféra-ionoszféra csatolási folyamatot a dipólmomentum, az ionoszférikus Pedersen-vezetőképesség és az IMF függvényében vizsgálva kimutatták a transzpoláris ionoszférikus potenciál szaturációját, amely jól illeszkedik egy jóval egyszerűbb modellhez (a Hill-modellhez) és a valóságban mért adatokhoz is.

Egy új geomágneses aktivitási index, az ún. IHV-index részletes analizálásával kimutatták, hogy a bolygóközi mágneses tér (IMF) az elmúlt 100 évben valóban jelentősen növekedett, de nem olyan nagymértékben, mint amilyennek az általánosan használt ún. aa-indexből adódna, de nem is olyan kis mértékben, amilyennek egy mások által elvégzett IHV-vizsgálatból kitűnt.

A napfolttevékenység jelenlegi minimumához közeledő időszakban rendkívüli geomágneses aktivitást észlelve különös jelentősége van annak a vártnál jóval összetettebb kapcsolatnak (többek között négy éves időeltolásnak), amit az elektromos téraktivitási index (a T index) és a napfolttevékenység között mutattak ki.

Totális napfogyatkozás időszakában kimutatták a pulzációk polarizációs ellipszisének különféle módosulásait (ellipticitás, irányváltás, tengelyelfordulás).

Kimutatták, hogy a magnetotellurikus impedancia-elemek és az indukciós vektor szórása napfogyatkozás alatt megnövekedik, mert az UW és a FLR típusú Pc3 pulzációk némileg eltérő indukciós hatással járnak.

Angliai állomásokon és Nagycenken mért légköri elektromos paraméterekben a korábban kimutatott egyirányú változásokat a légszennyezéssel terhelt athéni adatok is alátámasztják.

Kimutatták, hogy légköri potenciálgradiens évszakos változásában a téli maximum mellett kialakuló nyári másodlagos maximum, meleg El Nino években található.

Kimutatták a legutóbbi 33 évben a troposzféra és az alsó sztratoszféra izobárfelületeinek magasságában, hőmérsékletében, a szélsőségeiben és a kihullható csapadék mennyiségében mutatkozó trendeket, amely szerint a troposzféra például szárad.

Kimutatták, hogy az ionoszféra elektronsűrűségében tapasztalt észak-dél irányú aszimmetria nem kötődik az ún. decemberi anomália időszakához.

Az általuk kidolgozott időmeghatározásos és globális háromszögeléses eljárással sikerült a Columbia űrrepülőgép megfigyeléseivel egyidejűleg folyó nemzetközi ELF-VLF kampányban az ELVE-kezt előidéző villámkisüléseket egyértelműen azonosítani.

Az EURO-SPRITE konjugált sprite-megfigyelési kampányban mért tranziensek forráskisüléseinek töltésmomentum-meghatározásával kimutatták az európai villámkisülések kisebb intenzitását az észak-amerikai villámokéhoz képest. Horizontális villámkisülés következményeként megjelenő sprite-ok esetén is sikerült ELF-tranzienseket megfigyelniük.

Nagycenki Schumann-rezonancia vizsgálatokból kimutatható, hogy a Csendes-óceán térségében éppenséggel a hidegebb La Nina időszakokban nő meg a villámaktivitás, a szárazföldön tapasztalt ellenkező értelmű – a meleg El Nino periódushoz köthető – megnövekedéssel szemben.

Bebizonyították, hogy a szoláris kemény röntgensugárzás fluxus változásának domináns szerepe van az ELF frekvenciatartományban az egymástól távoli észlelő helyeken megfigyelhető azonos előjelű frekvenciaváltozások létrejöttében.

Elektromágneses szerkezetkutatás és környezet-geofizika, amelynek gazdasági-társadalmi haszna a geopotenciál megismerése és jövőbeni feltárása, illetve az egészséges környezeti feltételek biztosítása (Résztevők száma: 4 kutató és 4 segéderő, a költségek (50-60%-ban pályázati és megbízási forrásból származnak.)

A 2003-ben a CEL-007 szelvény mentén nyert magnetotellurikus adatokra elvégzett inverziók egyértelműen kimutatták a Közép-Magyarországi- és a Balaton-vonalat, és számos – ma még vitatott eredetű – anomáliára hívták fel a figyelmet.

Elkészültek az első invariáns rendszerű magnetotellurikus pszeudoszelvények. A rotációs invariáns-megjelenítést felszínközeli geoelektromos térképezésben is sikerrel alkalmazták, és feltárták a magnetotellurikus impedancia-tenzor és a geoelektromos látszólagos fajlagos ellenállás-tenzor közötti matematikai kapcsolatot.

Kimutatták, hogy az élő fa törzsében mért elektromos potenciálkülönbség elsősorban a hőmérséklettel, a relatív páratartalommal, a légköri potenciálgradienssel és a tellurikus áramokkal vannak szorosabb statisztikai kapcsolatban.

Levélszuszeptibilitás-vizsgálatok szerint a szennyezés Sopronban kizárólag a helyi közlekedésből származik, távoli források nincsenek.

Szeizmológiai Főosztály

Szélessávú földrengés megfigyelő hálózat létesítése, a megfigyelések eredményeinek feldolgozása, értelmezése és társadalmi hasznosítása (3 kutató és 2 segéderővett részt a munkában. A műszerek árát -2004-ben 7,5 millió forintot- pályázatokból biztosították. A telepítési és üzemeltetési költségek hozzávetőleg 40%-a származik költségvetési forrásból.)

A 2003. és a 2004. években a szükséges berendezések beszerzésével és az állomáshelyek kiválasztásával megkezdett szélessávú (very broad band) szeizmológiai állomáshálózat fejlesztése öt új állomás telepítésével folytatódott.

Az új – alapkutatási és szeizmológiai szolgálat ellátására alkalmas – hálózat egyaránt lehetővé teszi a Kárpát-medence földrengések megfigyelését és a távoli szeizmikus események nagy pontosságú detektálását. Az új szélessávú állomáshálózat állomásai on-line kapcsolatban állnak a Budapesti Szeizmológiai Observatóriummal és megindult az adatok fogadása és közvetlen felhasználása több nemzetközi adatközpontban is (pl. GEOFON, ORFEUS).

2004. február 19-én a PKSM (Mórág) állomáson kezdte meg működését és kapcsolódott be a hazai és nemzetközi adatszolgáltatásba. 2004. július 12-én a BUD (Budapest) állomáson is működni kezdett egy szélessávú műszer. 2004. augusztus 4-én a SOP (Sopron) állomás is Internet kapcsolatot kapott, így azóta az adatok onnan is közel valós időben érkehetnek a feldolgozó helyekre. 2004. október 26-án Becsehelyen telepítettünk egy szélessávú Interneten elérhető berendezést kísérleti céllal. A tarpai állomás telepítésével kapcsolatos – a helyi adottságok miatt – összetett feladatokat 2004-ben sikerült megoldanunk és így várható, hogy ezen a helyen a legközelebbi jövőben megkezdje működését egy on-line elérhetősgű szélessávú állomás.

A budapesti adatközpontban telepített szoftver lehetővé teszi az ide érkező adatok folyamatos megjelenítését. Ennek célja kettős, egyrészt a talajmozgást lehet nyomon követni, másrészt az állomások működését ellenőrizni.

Folyamatos volt az adatfeldolgozás, archiválás, a regisztrátumok kimérése és megküldése a Nemzetközi Szeizmológiai Központnak (ISC). A főosztály kutatói állították össze a Georisk KFT-vel közösen megjelentetett "Hungarian Earthquake Bulletin"-t. Folyamatos ügyeleti szolgálatot láttak el és eleget tettek a lakosság és a tömegtájékoztatás részéről jelentkező – 2004-ben jelentősen megnövekedett – tájékoztatási kéréseknek.

A Kárpát-medence és a globális szeizmicitás kutatása terén

- A Nyugati-Kárpátok térségének vizsgálata megmutatta, hogy itt a szeizmicitás szintje nem haladja meg a Pannon-medence belsejében megfigyeltet és 10 % annak a valószínűsége annak, hogy a térségben $1,2-1,7 \text{ m/sec}^2$ –nél nagyobb csúcsgyorsulás keletkezzen 100 év alatt, földrengések következtében.
- Az ISC adataira támaszkodva mintegy 40 évre visszamenően mintegy 1900 – Kárpát-medencében keletkezett földrengés – lehetséges fészekmechanizmusát határozták meg.
- A hazánk területén kipattant földrengések esetében 1964 és 2003 között időszakra sikerült egy jellegzetes napi periodicitást találni a földrengések eloszlásában. Ezt a napi változást sikerült a Föld számos területén úgyszintén kimutatni.
- Szeizmológiai, mérnökszeizmológiai műhelyt sikerült kialakítani, mely több intézményen átnyúlik (MTA GGKI, ELTE Geofizikai Tanszék, MTA-ELTE Környezetfizikai és Geofizikai Kutatócsoport, BME Szilárdságtani és Tartószerkezeti Tanszék, BME Tartószerkezetek Mechanikája Tanszék, Széchenyi István Egyetem Szerkezetépítési Tanszék)

Módszertani és geodinamikai kutatások (Résztevők: 5 kutató. Forrás: 50% OTKA és egyéb pályázatok)

FTAN (frequency-time analysis) eljárás segítségével 101 esetben sikerült meghatározni a felületi hullámok csoportsebesség görbéit, melyek periódustartományuk 0,8 és 2,0 s közé esett.

Metodikát fejlesztettek ki a lokális földrengések fészekmechanizmusának teljes hullámforma inverzióval való meghatározására és az eljárást több hazai földrengés momentum tenzorának meghatározására alkalmazták

A köpenyáramlások felszálló ágának vizsgálatát célzó numerikus modellezések segítségével kutatták a köpeny viszkozitás és a hőmérséklet/mélység közötti kapcsolatot, valamint a feláramlások felszíni megnyilvánulásait.

Megállapították, hogy a Föld forgássebesség ingadozásai hatással vannak a földrengések időbeli és szélesség szerinti eloszlására.

A globális hőmérséklet változásai és a pólusmozgás között 2003-2004-ban egyértelmű kapcsolatot sikerült meghatározniuk. Ez, mivel a hőmérsékletváltozásokat a pólus helyzetének ingadozásai időben megkésve követik lehetővé, teszik utóbbi prognózisát, ami fontos gyakorlati (navigációs) szempontból.

A földrengés zónákban megfigyelt deformáció sebességek és a momentum magnitúdók (M_w) közötti kapcsolat, vizsgálataik szerint, elméletileg lehetővé teszik az adott forrás zónából egy megválasztott időintervallumon belül várható legnagyobb M_w érték meghatározását, de ehhez a jelenlegi GPS mérési pontosság lényeges javítására van szükség.

A nap hosszúság és a földmágneses tér vizsgálata során megállapították, hogy szoros de összetett kapcsolat mutatható ki az excentrikus dipólus momentumának (M_0) és föld középponttól mért távolságának valamint a naphosszúságának változásai között az éves-évtizedes periódusok tartományában, de feltételezhető, hogy a magbéli bonyolult hidrodinamikai áramlások összetett hatása hozza létre a jelenséget.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai intézményi kapcsolatok:

MTA X. osztály (két tag), MTA Geodéziai Tudományos Bizottság (elnök és titkár), Geofizikai Tudományos Bizottság (elnök), VEAB szak- és munkabizottságok, Űrkutatási Tudományos Tanács, UGGI, IAGA, COSPAR, URSI, IAG, IASPEI EASE, EAEE, IAEE, Nemzetközi Litoszféra Program nemzeti bizottságai, MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíj Kuratórium Földtudományi Szakértői Kollégiuma, Magyar Geológiai Szolgálat Tudományos Tanácsa, MFTTT elnöksége, Magyar Geofizikusok Egyesülete, Magyar Asztronautikai Társaság, MTA AKT, MTA Matematikai és Természettudományi Kuratórium, MTA Matematikai és Természettudományi Kuratórium fiatal kutatók beszámolásának IV. bizottsága (elnök), Nyugat-Dunántúli Regionális Fejlesztési Tanács, IIF Alkalmazói Tanács, HUNGARNET, OTKA Szakkollégium, Acta Geodaetica et Geophysica Hungarica szerkesztősége (főszerkesztő is), EUROCODE 8 Szabványosítási Bizottság, NAÜ Földrengés Szakértői Bizottság, Kormányzati Koordinációs Bizottság Tudományos Tanácsa és Földrengés Elleni Védekezés Munkabizottsága, Doktori iskolai tagságok (NYME, ELTE, BME, ME), doktori és habilitációs bizottsági tagságok (NYME, BME).

Hazai oktatási tevékenység:

Nyugat-Magyarországi Egyetem: nappali környezettudományi és környezetmérnöki képzés, Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola geo-környezettudományi program, matematikai alapozó tárgyak, diplomamunka-konzulens, bírálóbizottság diplomavédésnél, doktori szigorlatoknál, doktori témavezetések, államvizsga bizottság, Eötvös Loránd Tudományegyetem és Miskolci Egyetem: előadások, doktori iskola előadások, gyakorlatok és szakdolgozatok, doktori témavezetések, BMGE: doktori iskola előadások.

Nemzetközi kapcsolatok:

Geophysical Prospecting (Editor)

CEI Earth Science Committee of the WG Science & Technology (Secretary General), CEI Working Group on Earthquakes (coordinator).

Nemzeti képviselő az alakuló E-STAR (European Solar Terrestrial and Atmospheric Research) program strasbourgi rendezvényén.

COST 271, WP 3.3, COST 625 (3D monitoring of active tectonic structures), COST 721.

Journal of Geophysical Research, Studia Geophysica et Geodaetica, Journal of Geodynamics, Geophysical Prospecting, Geophysics, stb. cikkek bírálata. Pályázatok bírálata a cseh tudományos alap és az Egyiptomi Nemzeti Csillagászati és Geofizikai Intézet (Hewlan) részére.

Brémai Nemzetközi Egyetem, Prágai Légkörfizikai Intézet, Pekingi Földtudományi Intézet, L'Aquila-i Egyetem, Bécsi Akadémia Űrkutatási Intézet, Grazi Műszaki Egyetem, Jénai Egyetem, Neuchatel-i Egyetem, Reading University, Meteorological Department, Anglia, Massachusetts Institute of Technology, Parsons Laboratory, USA, Tel Aviv University – Izrael, Bécsi Műszaki Egyetem, Université Paris Sud, CETP (St. Maur), GeoForschungsZentrum Potsdam, Observatoire de Paris, Teheran University, Stuttgart University, Darmstadt University of Technology, Institut of Oceanography of the Russian Academy of Sciences, Usikov Institute for Radio-Physics and Electronics National Academy of Sciences of the Ukraine, Kharkov.

IAG Comm V: Earth Tides, SC3: Fundamental Parameters, IAG SG 2.2 'Forward Gravity Modeling Using Global Database', IAG SC4.2 Working Group 4 'Monitoring of Landslides and System Analysis'(elnök), IAG SSG 4.187 'Wavelets in Geodesy and Geodynamics', IAG SSG 4.190 'Non-probabilistic assesment in geodetic data analysis', SSG 4.189: 'Dynamic theories of deformation and gravity fields'.

Külföldi oktatási tevékenység:

Babes-Bólyai Tudományegyetem, Kolozsvár: Általános és alkalmazott geofizika
Doktorandusz képzés a Teheráni Egyetemen: A szilárd Föld geodinamikája

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok:

Az intézet 10 OTKA-pályázatot gondoz:

- A földi árapály és a vele kapcsolatos geodinamikai jelenségek mérési módszereinek továbbfejlesztése, a Pannon medencében regisztrált adatok feldolgozása és komplex értelmezése
- Új direkt és inverz módszerek a nehézségi erőter szintetikus modellezésében
- Matematikai modellek a digitális fotogrammetriában
- Földi elektomágnesség c. tudományos iskola
- A Schumann-rezonanciák összefüggése a globális éghajlattal SPECIAL II (ESF által támogatott)
- Új irányzatok a magnetotellurikában
- Magnetoszféra- és bolygóközi tér-kutatás pulzációkkal
- Alkalmazott matematikai módszerek a geodéziában
- A Föld pólusmozgásainak komplex vizsgálata
- Lokális földrengések hipocentrumának és fészekmechanizmusának meghatározása teljes hullámforma inverzióval

Négy támogatott IHM-téma:

- MŰI Költségvetési Támogatási Pályázat
- A Naprendszer kutatása űrkutatási programok keretében, beleértve a Föld körüli térségre vonatkozó vizsgálatokat 2002 (TP-151)
- A magnetoszféra vizsgálata (energiacsatolás a napszél és a magnetoszféra között – a geomágneses pulzációk szerepe) 2002 (TP-121)
- Magas légköri elektro-optikai emissziók megfigyelése a Columbia (STS-107) űrmisszió és a felszíni ELF mérési kampány keretében (TP-224)

IKTA: Intelligens adatelemző központ

NIIFP: Számítóközpont fejlesztése

Nemzetközi pályázatok:

- Földcsuszamlás riasztó rendszer integrált optimalizációja, (EU5 keretprogram)
- Szerkezetek becslése, monitorozása és ellenőrzése, (EU5 keretprogram)
- Szeizmológiai hálózatok fejlesztése, (EU5 keretprogram)
- DFG GL-142/12 (német): résztvevő

- NATO Collaborative Linkage Grant (EST.CLG.980431) „Lightning Induced Wave Observations at Spitsbergen” (2004-2005)

Az intézet kutatói 6 *TÉT* együttműködés témavezetői:

- Francia-Magyar: Földrengések és a Föld rotációs vektora
- Indiai-Magyar: Magnetotellurikus és szeizmikus közös inverzió
- Német-Magyar: A földforgás és a planetáris klimatikus viszonyok kapcsolata
- Osztrák-Magyar: Lokális geodinamika, katasztrófák előrejelzése
- Osztrák-Magyar: Rövidperiódusú pólusmozgások értelmezése

MTA bilaterális együttműködések:

- DFG-MTA: A Liouville egyenlet geodinamikai alkalmazása
- Indiai-Magyar: Magnetotellurika (INSA)
- Orosz-Magyar: Extenzométeres mérések eredményeinek értelmezése, árapály súrlódás
- Román-Magyar: A Kárpát-medence tektonikai mozgásvizsgálata
- Szlovák-Magyar: Extenzométeres mérések
- Ukrán-Magyar: Schumann rezonanciák kutatása

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Bencze P, Buresova D, Lastovicka J, Márcz F: Behaviour of the F1 region, and Es and spread F phenomena at European middle latitudes, particularly under geomagnetic storm conditions. *Ann. Geophysics*; 47(2/3):1131-1143, 2004
2. Melnikov A, Price C, Sátori G, Füllekrug M: Influence of the Solar Terminator Passages on Schumann Resonance Parameters. *J. Atmos. Solar-Terr Phys*; 66: 1187-1194, 2004
3. Price C, Greenberg E, Yair Y, Sátori G, Bór J, Fukunishi H, Sato M, Israelevich P, Moalem M, Devir A, Levin Z, Joseph JH, Mayo I, Ziv B, Sternlieb A: Ground-based detection of TLE-producing intense lightning during the MEIDEX mission on board the space shuttle Columbia. *Geophysical Research Letters*; 31: L20107, 2004
4. Varga P, Engels J, Grafarend E: Temporal variations of the polar moment of inertia and the second degree geopotential. *Journal of Geodesy*; 78: 187-191, 2004
5. Vellante M, Lühr H, Zhang TL, Wesztergom V, Villante U, et al. (11): Ground/satellite signatures of field line resonance: Test of theoretical predictions. *Journal of Geophysical Research*; 109: A06210, 2004
6. Vogt J, Zieger B, Stadelmann A, Glassmeier K-H, Gombosi TI, Hansen KC, Ridley AJ: MHD Simulations of Quadrupolar Paleomagnetospheres, *Journal of Geophysical Research*; 109: A12221, 2004
7. Zieger B, Vogt J, Glassmeier K-H, Gombosi TI: Magnetohydrodynamic Simulation of an Equatorial Dipolar Paleomagnetosphere, *Journal of Geophysical Research*; 109: A07205, 2004
8. Williams ER, Sátori G: Lightning, Thermodynamic and Hydrological Comparison of the Two Tropical Continental Chimneys. *J. Atmos. Solar-Terr Phys*; 66: 1213-1231, 2004

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Földtudományi Kutatóközpont, Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet

Átlagléttség ¹ :	66	Ebből kutató ² :	33
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			10
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			78
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			34
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	11	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	14
nemzetközi együttműködés keretében:	8	SCI által regisztrált folyóiratban:	9
összesített impakt faktor:	12,600	összes hivatkozás száma ⁴ :	142
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			142
Megjelent könyv:	2	könyvfejezet:	11
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	2	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	35	poszterek száma ⁶ :	28
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	15	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			281 MFt
Beruházási támogatás:	7 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	3
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			10
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			-
NKFP:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			9
EU forrásból:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	11 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			4 MFt

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A 2002-2004. évi középtávú kutatási koncepciónak megfelelően a Geokémiai Kutatólaboratórium (GKL) fő feladatát 2004-ben – hasonlóan az előző évekhez – a litoszférát felépítő ásvány-, kőzet-, és fluidum-képződési folyamatok, az izotóp-geokémia, a környezet-geokémia és a szerves-geokémia területén végzett alapkutatások alkották. A természetes környezet állapotának megőrzését és az életminőség javítását célzó, növekvő fontosságú környezettudományi kutatásokhoz kapcsolódva a GKL vizsgálta a geoszférákban, illetve azok határfelületein végbemenő geokémiai folyamatokat. E folyamatok közül elsősorban a kis szemcseméretű rétegszilikát ásványok (agyagásványok) környezeti hatásokat tükröző és befolyásoló ásványszerkezeti és ásványkémi sajátságait, a bioesszenciális és toxikus nyomelemek körforgalmát, a talajok, valamint a felszíni és felszín alatti vízbázisok sajátságait és az épített környezetet ért antropogén hatásokat és kulturális örökségünk egyes tárgyi emlékeit tanulmányozta. A GKL folytatta egyes ásványi nyersanyagaink (elsősorban a szénhidrogének és a mangánérc) képződését, migrációját és felhalmozódását eredményező, ill. befolyásoló geokémiai és ásvány-kőzettani folyamatok kutatását is.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Hasonlóan az előző évekhez a GKL munkatársai két, egymással szoros kölcsönhatásban lévő témacsoportban tevékenykedtek.

A litoszférát alakító ásvány-, kőzet-, ásványi nyersanyag-képződési folyamatok és fluidumok komplex geokémiai vizsgálata

Folytatva a *Kárpát-Pannon térség* anomális fizikai tulajdonságokkal rendelkező *litoszférája anyagi összetételének* megismerését, 2004-ben az erdélyi Persányi-hegységben talált, *a neogén vulkáni működéssel felszínre került köpenyeredetű gránát-piroxénit xenolitok* Sr, Nd és O izotóparányait, valamint a xenolitokat alkotó ásványfázisok fő- és nyomelem tartalmait határozták meg. A nyert adatokból kiszámolták a xenolitok egyensúlyi hőmérséklet és nyomás adatait. Ezekből megállapították, hogy a xenolitokat alkotó kőzetek protolitjai nagy valószínűséggel magmás kumulátumok voltak. A kutatás során a korábban már vizsgált alsókéreg eredetű metamagmás granulit xenolitokat alkotó ásványok (gránát, klinopiroxén, amfibol, plagioklász és ilmenit) nyomelem tartalmát is meghatározták. Az adatok alapján a Nb és a Ta ásványtanilag elkülönült a Zr-tól és a ritkaföldfémektől, amelynek a parciális olvadási folyamatban végbement nyomelem frakcionációban lehetett szerepe. A xenolitokat alkotó ásványok Li tartalma és az oxigén izotóparányok közötti korreláció a protolitok óceán aljzati eredetét támasztja alá. A korábbi évek MTA doktori értekezésekben összefoglalt, illetve jelenleg is működő nemzetközi együttműködések keretében született, a köpeny

összetételét és geokémiai folyamatait értelmező eredmények jelentős részét 2004-ben publikálták rangos nemzetközi szakfolyóiratokban. A Kárpát-Pannon térség litoszférájának komplex kutatását nemzetközi együttműködés keretében 5 fős kutatócsoport végezte, ebből 2 fő tartozott a GKL állományába. Az intézeti ráfordítás közel 5,5 millió Ft volt, ebből kb. 2,6 millió Ft a pályázati forrásból elnyert összeg.

A GKL-ben 2004-ben koncentráltan, komplex módszer-együttesek alkalmazásával folytatódott a *regionális kőzetátalakulás (metamorfózis)* kőzetgenetikai célú kutatása. A GKL-ben az ásványok ritkaföldfém-tartalmának elektron-mikroszondás kvantitatív elemzésére és a monacit ásvány nyomelem koncentráció-arányain alapuló *kormeghatározásra* korábban kifejlesztett, illetve továbbfejlesztett eljárások kőzetgenetikai alkalmazására került sor 2004-ben. A modell-terület a Tiszai nagyszerkezeti egység nagyalföldi kristályos aljzatának szénhidrogénkutatás és -termelés szempontjából kiemelkedő fontosságú része: a Szank-Jásszentlászló környéki szerkezet volt. Az alkalmazás egyik legjelentősebb eredménye, hogy az eljárással lehetővé vált az ún. "kevert korok" elkülönítése. A szanki metamorf kőzetekben a monacit kristályosodása több szakaszban ment végbe: kb. 300 millió évvel ezelőtt kezdődött, majd 247 és 187 millió évvel ezelőtt folytatódott. Ezzel szemben a Jásszentlászló környékéről származó granitoid mintákban a monacit meglepően fiatal (75 millió év). A monacitok többsége azonban egy, kb. 25 millió évvel ezelőtt lezajlott földtani eseményről tanúskodik. A monacit ásványon alapuló kormeghatározás egy másik alkalmazási területe - bilaterális együttműködés keretében - a Nyugati Kárpátok volt. A Nyugati-Kárpátok egyes granitoidjain végzett hasonló vizsgálatok új adatokat nyújtottak a Tribec hegység granitoidjainak kialakulásához. Az eredmények arra utalnak, hogy a H₂O-telített rendszerben végbement kis- és közepes fokú metamorfózis hatására a xenotim - a monacit esetében már leírt folyamathoz hasonló folyamattal - allanittá és apatittá bomlik.

Ellentétben a közepes és nagy fokú (> 500 °C hőmérsékletű) kőzetátalakulások termékeivel, a kis hőmérsékletű metamorfotokat létrehozó (át)kristályosodási és deformációs eseménysorozatok (*polimetamorf szakaszok*) megbízható *elkülönítését* számos (részben elvi, részben módszertani) probléma nehezíti meg, illetve teszi gyakran lehetetlenné. E területen lényeges előrelépést jelentett a D-gömöri (Szlovákia) és ÉK-magyarországi ún. *Mellétei egység* polimetamorf jellegének felismerése és értékelése. A Bódva völgyében (ÉK-Magyarország) mélyült mélyfúrások által harántolt *mezozoos ofiolit sorozat* metabazalt és metagabbro *kőzeteiben* változatos kémiai összetételű amfibol ásványokat határoztak meg. Ezek képződését, illetve kémiai heterogenitását egyrészt a kőzetsorozatot ért alpi (jura-kréta korú) polimetamorfózis, másrészt a kőzetek mikrodomén szintű kémiai heterogenitása, inhomogenitása, harmadrészt a metamorf hatások földtani értelemben vett viszonylag kis időtartalma és a kis hőmérsékletből adódó kis diffúziós és reakció sebességek okozták. Ez a kémiai összetételbeli változékonyság – kisebb mértékben – megjelenik a kloritok összetételében is.

A *rétegszilikátok* [közülük is a dioktaéderes világos csillámok (illit-muszkovit csoport) és a klorit-csoport] - lévén az üledékek és az üledékes kőzetek leggyakoribb és egyben a környezettel aktívan kölcsönható komponensei - igen fontos szerepet játszanak a *kőzettéválás és a kőzetátalakulás folyamataiban*. 2004-ben folytatódott ezen ásványcsoportok GKL-ben immár nagy hagyományokkal rendelkező, de folyamatosan megújuló kutatása. Ennek keretében a kis hőmérsékletű metamorfózis szempontjából klasszikus modell-területnek számító *Svájci Központi Alpok* Helvétai zónájában a jurától eocénig változó korú típus-

szelvényei jelentős részében az általánostól eltérő relációkat mutattak ki a metamorfózis fokának (közelítő hőmérsékletének) meghatározására szolgáló módszerek [illit és klorit „kristályossági” indexek (Kübler és Árkai index), vitrinit reflexióképesség, stb.] között. A vizsgált képződmények jelentős részénél az illit „kristályosság” (Kübler index) értékek anomálishan nagyok voltak, csupán diagenetikus viszonyokat jeleztek, szemben az egyéb paraméterekkel. Sokoldalú nemzetközi együttműködés keretében, részletes röntgen pordiffraktométeres, transzmissziós és analitikai elektronmikroszkópos, elektron energia-vesztéses spektroszkópiái, infravörös abszorpciós spektrométeres, valamint szerves és szervetlen elemvizelési elemvizelési módszerekkel kimutatták, hogy az anomáliát a dioktaédres világos csillám szerkezetek sajátos rétegek közötti térkitöltése okozza. A domináns kálium mellett alárendelt, de jelentős mennyiségű nátrium, valamint kis mennyiségű ammónium-ion alkotja a rétegek közötti térkitöltést. A különböző rétegek közötti kationok nem szabályos vagy szabálytalan kevertréteges szerkezetet képeznek, hanem szabálytalan doménszerű elrendeződést mutatnak a világos csillámokban. A jelenség a világos csillám nem egyensúlyi jellegű metamorf fejlődésének egyik fontos bizonyítéka és sokkal gyakoribb, mint ahogyan azt korábban vélték. A jelenség felismerése az illit-muskovit szerkezeti és kémiai fejlődésén alapuló metamorf fok meghatározási módszer eredményeinek helyes értelmezéséhez elengedhetetlen. A kevert rétegek közötti kation-kitöltésű világos csillámok keletkezését a litológiai viszonyok és a kőzetkémizmus sajátosságai határozzák meg. Az eredmények a környezettudományban (elsősorban a finomtörmelék (agyagos) kőzetek, mint hulladékok biztonságos elhelyezésére alkalmas geológiai objektumok kutatásában) közvetlenül is hasznosulnak (példa erre a Mecsek-hegységi ún. Bodai Aleuolit Formáció, mint a nagy radioaktivitású hulladékok elhelyezésére kiválasztott képződmény korábban és jelenleg intenzíven folyó ásvány-kőzettani kutatása).

Olasz együttműködés keretében összefoglalták a *Keleti-Alpok délalpi paleozóos aljzatának metamorf fejlődéstörténetére* vonatkozó ismereteket. Az ismeretek alapját alkotó metamorf kőzetgenetikai adatok közül elsősorban illit és klorit „kristályossági” index értékekkel, világos csillám geobarometriai adatokkal és vitrinit reflexióképesség adatokkal járultak hozzá a komplex értelmezéshez. Meghatározták a variszkuszi metamorfózis fokának (hőmérsékletének) térbeli változásait. Megállapították, hogy a zöldpala fáciesű és az anchizónás képződmények határát korábban tévesen állapították meg és tüntették fel az Alpok metamorf térképein (1973, 1999). A tényleges határ ettől lényegesen keletebbre húzódik. A variszkuszi metamorfózist csak lokálisan érte kisebb (diagenetikus – anchimetamorf) hőmérsékletű alpi felülbélyegzés.

Az ÉK-magyarországi Bükk, Upponyi- és Szendrői-hegység paleozóos és mezozóos földtani képződményei – amelynek alpi regionális metamorfózist korábban a GKL kutatói ismerték fel és jellemezték részletesen – eredetüket tekintve a Belső Dinaridákkal mutatnak szoros földtani rokonságot. Ezért kezdődött el 2001-ben a horvátországi *Medvednica hegység* rendszeres *metamorf kőzettani vizsgálata*, amely jelentős állomáshoz érkezett 2004-ben. A Medvednica hegység különböző tektonosztratigráfiai egységeibe sorolható finomszemcsés kőzetek diszperz szénült szerves anyag (vitrinit) szemcséinek reflexióképesség mérése segítségével megbecsülték az egyes egységeket ért kőzetátalakulás hőmérsékletviszonyait. A mért reflexióértékek alapján számított hőmérséklet értékek a paleo-mezozóos sorozat esetében 350-400 °C, a jura ofiolit mélangé komplexum esetében 250 °C, a kréta-paleocén sorozat esetében 200 °C körül változtak. Ezek a hőmérsékleti adatok összhangban vannak a filloszilikát „kristályossági” index adatokból becsültekkel. A hegység paleo-mezozóos

összetéből származó néhány kiválasztott kőzetmintából dúsított szerves anyag Raman spektroszkópos vizsgálatát is elvégezték. A Raman spektrumokból az össz szervesanyag átlagos rendezettségére jellemző mutatókat számoltak. A Raman-spektroszkópiai adatok geotermométerként való alkalmazásához a kalibráció további pontosítása szükséges, különösen a kis hőmérsékletű tartományban. Az agyagpala, fillit, metavulkanit-metaszediment és zöldpala kőzetek különböző mikroszerkezeti helyzetű, de ásványkémiailag szempontból homogénnek tekinthető K-világos csillám és klorit szemcséi segítségével az empirikus klorit „termométerek” mellett a klorit–K-világos csillám (fengit) termobarométert is sikerrel alkalmazták. Az ásványkémiailag összetétel-arányok alapján számolt hőmérséklet- és nyomásértékek 300-400 °C és 3-4 kbar között változtak. A metamorf petrogenetika komplex kutatását változó létszámú (3-10 fő) kutatócsoport végezte, melyből 1-5 fő volt magyar, és 1-4 kutató tartozott a GKL állományába. Az intézeti ráfordítás közel 8 millió Ft volt, melyből kb. 3 millió Ft volt a pályázati forrásból elnyert támogatás.

A Szerb Tudományos és Művészeti Akadémiával együttműködve összefoglalták a *karsztbauxit telepek ritkaföldfém ásványtanát és geokémiáját*. Az összefoglalás Magyarország, a hajdani Jugoszlávia, Görögország, Franciaország és Jamaica előfordulásaira terjedt ki. Az összefoglalóban az új ásványtani és geokémiailag törvényszerűségek ismertetése mellett a bauxitok ritkaföldfém-tartalma gazdasági potenciáljának értékelésre is kitértek. A téma kutatását 3 fős nemzetközi kutatócsoport végezte, melyből 2 kutató tartozott a GKL állományába. Az intézeti ráfordítás közel 2 millió Ft volt.

Az üledékes környezetű Mn-telepek képződésének új modelljét dolgozták ki. Az *úrkúti feketepala* környezetű, *karbonátos Mn ércesedés* esetében olyan *biogén-bakteriális folyamatokat* bizonyítottak, amelyek a telep fémanyagának legfontosabb dúsító mechanizmusát alkották (primér oxidatív bakteriális ciklus). Az eredmények a környezetszennyezés és elhárítás környezetgeokémiailag folyamatainak megismerésével a gyakorlatban is hasznosulhatnak: a kemolitoautotróf baktériumok működésével számos mérgező nehézfém köthető meg szilárd fázisban, megelőzve ezzel a vizekben történő tovaterjedést és ez által a nagy kiterjedésű szennyeződések kialakulását. A karbonátos Mn-ércék kutatását 10 fős kutatócsoport végezte, melyből 8 fő volt magyar, és 5 kutató tartozott a GKL állományába. Az intézeti ráfordítás közel 12 millió Ft volt.

A *szénhidrogének* szintén nagy hagyományokkal rendelkező *szerves geokémiailag kutatását* folytatva 12 dunántúli (Zalai medence) kőolaj biomarker adatait hasonlították össze a Rezi-1 jelű fúrás mintáiból extrahált bitumenek biomarker adataival. A kőolajok közül négyet találtak triász korú anyakőzetből képződöttnek. A kösszeni márga és a triász korú kőolajok rokonsága valószínűsíthető. Az egyik ilyen korrelációs bizonyíték az oleanán hiánya (o/h=0) a bitumenben és a triász korú kőolaj mintákban. A triász korú kőolajok és a kösszeni márgából származó bitumenek a csoport-összetételekből képzett mutatók (CHtel/CHar és Σ CH/NSO) alapján is rokonságot mutattak. Az izoprenoid mutatók közül a pr/ph <1 arány redukzív felhalmozódási körülményekre utal a triász kőolajok, és oxidatív felhalmozódási körülményeket jelez (pr/ph >1) a fiatalabb kőolajok esetében, figyelembe véve az utóbbiak oleanán tartalmát (o/h=0,31 ill. 1,37) is. A feltételezett anyakőzet/kőolaj korrelációt a minták hopán/szterán hányadosa által jelzett hasonló mikrobiális hatás is megerősíti. Csoportosítási feltevéseket alátámasztja a moretán/hopán hányados és a 20S-szterán izomerizációs aránya is, mely szerint a terciér kőolajokban a 20S-szterán izomerizációja kisebb konverziójú, a moretán/hopán hányados nagyobb, mint az idősebb (jelen esetben triász) kőolajokban.

A *korai diagenézis* folyamatait a szterán- és hopánvázis vegyületek konfigurációs izomerizációs reakciónak konverzióival (moretán→hopán, 22S→22R a C₃₁-C₃₃ homohopánokban, a 20S → 20R az etilkolesztánban és ββ→αα a C₂₉ reguláris szteránokban) sikeresen jellemezték. A diagenézis hipotetikus skáláján (0%→100%) a mátyáshegyi formáció vizsgált IIS kerogén típusú mintái 20-70% közé esnek. A metanogén bakteriális tevékenységet külön becsülték az összbakteriális tevékenységen belül a 2,610,15,19-pentametileikozán/*n*-dokoán hányados alapján; és legalább háromféle bakteriális hatást észleltek. A szerves geokémiai témát 3 fős magyar kutatócsoport művelte, melyből 2 fő tartozott a GKL állományába. A becsült intézeti ráfordítás közel 5 millió Ft volt, melyből kb. 1,7 millió Ft volt a pályázatból elnyert támogatás.

A földtani környezet geokémiai állapotának és változásainak kutatása

A *bioesszenciális és toxikus nyomelemek körforgalma* témakörben kísérleteket végeztek a mezőgazdasági talajkezelésben gyakran használatos szennyvíziszapból felszabaduló nehézfémek viselkedésének megismerésére. E kísérletek eredményei túlmutatnak a mezőgazdasági alkalmazáson, hiszen a környezetvédelemben szennyezések terjedésének modellezéséhez, hulladéktározók építésének tervezéséhez is felhasználhatók. A kísérletek igazolták, hogy a talajok összetételétől és más fémek jelenlététől függetlenül a fémek affinitása a talajok felé a Cu > Pb > Zn > Ni sorban csökken és a fajlagos adszorpció csökkenését egyedül a pH határozza meg. A karbonátos összetétel immobilizálja a legtöbb nehézfémet. Legkevesebb nehézfémet az agyagbemosódással jellemzett minták kötöttek meg, azonban a szelektivitás itt volt a legszembetűnőbb. Bizonyítást nyert az is, hogy az agyagfrakciók 30–40%-kal több nehézfémet képesek megkötni, mint a teljes talajminták. Az adszorpcióhoz hasonlóan a deszorpció is szelektív folyamat. A megkötött fémek mobilizálhatósága a Cu < Pb << Zn (< Ni) sorban nő.

Ásványtani, agyagásványtani és laboratóriumi adszorpciók modellkísérletek alapján potenciális regionális hulladéklerakók kijelöléséhez szolgáltatott nélkülözhetetlen alapismereteket. A környezetvédelmi szempontból legalkalmasabbnak a legnagyobb szmektit-tartalmú, jó adszorpciók kapacitású képződmények adódtak. Az eredmények hulladéktározók biztonságos és gazdaságos kijelöléséhez használhatók fel. A *montmorillonitok* fémion-megkötésének törvényszerűségeire és duzzadóképeségére vonatkozó eredmények nagy gyakorlati jelentőségűek az egészséges környezet megóvásában. Az eredmények hozzájárulhatnak a különböző környezetvédelmi határértékek harmonizációjához, valamint nélkülözhetetlenek a hulladéktározók biztonságos és gazdaságos kialakításához. A talajgeokémia és talajásványtan komplex kutatási témában 6 fős kutatócsoport dolgozott, melyből 4 kutató tartozott a GKL állományába. Az intézeti ráfordítás közel 11 millió Ft volt, melyből kb. 1,5 millió Ft volt a pályázati forrásból elnyert támogatás.

A földtörténeti múltban végbement *globális* változások vizsgálatának területén a *perm-triász* és *triász-júra határon lezajlott kihalási eseményeket* hazai együttműködés keretében elemzik. A perm-triász kutatási projektben több szelvény előzetes elemzését követően a Bükk-hegységi Bálvány-észak szelvény részletes stabilizotópos vizsgálatát végezték el. A megfigyelt szénizotópos anomália a globális szén ciklus komponenseinek megváltozásához köthető. A változás okaként a vulkanizmus és/vagy extraterresztrikus becsapódás mellett a hirtelen tengerszintváltozás lehetősége is felmerült. A triász-júra eseményt kutató projekt során a világszerte elismert, Vác környéki csővári szelvényt a korábbinál részletesebben dolgozták

fel. A részletes elemzések alapján a kérdéses kihalási esemény feltételezhetően nem egyetlen és egyszeri hatás (pl. becsapódás) eredménye, hanem a környezeti feltételek extrém fluktuációjának következménye volt.

A *klímarekonstrukció* geokémiai alapjainak bővítése céljából a Duna és a Tisza folyóban élő perzisztens puhatestűek és a folyóvizek vegetációs idő alatti stabilizotópos kapcsolatrendszerét vizsgálták. A Tisza folyó szabályozása jelentős mértékben megváltoztatta a folyóban élő *Unio* fajok karbonátos vázának mind a szén, mind az oxigén stabilizotópos összetételét, míg a Duna esetében ugyanezen hatás jelentéktelen volt. E megfigyelés arra figyelmeztet, hogy az öskörnyezeti változások kimutatásakor körültekintően meg kell vizsgálni, hogy a környezeti változást klímaváltozás okozta-e vagy sem.

Egy további esettanulmány is arra utal, hogy különös körültekintéssel kell eljárni *a geokémiai (stabilizotóp-geokémiai) adatok paleoklimatológiai célú felhasználásánál*. A tatai Porhanyó-bánya és a Kőpíte-hegy édesvízi mészkövének vizsgálata során végzett terepi megfigyelések szerint a területen egykor páratlanul nagy aktivitású forrástevékenység zajlott le, melynek nyomai forrás-kürtök formájában ma is jól láthatók a kőfejtő falán. A Porhanyó-bánya édesvízi mészkövének stabil szén- és oxigénizotópos inhomogenitását fáciesváltozékonyság okozta, ezért a szelvény szerinti stabilizotóp-geokémiai vizsgálatokból paleoklimatológiai következtetések nem vonhatók le.

Folytatva a korábban megkezdett vizsgálatokat, a budakalászi édesvízi mészkövet követően a recens egerszalóki *édesvízi mészkövön* is sikerült scanning elektronmikroszkópos (SEM) felvételek segítségével egyértelműen kimutatni mikrobiális hatást, illetve a mikrobiális működés stabilizotóp-összetétel módosító hatását a mészkőkiválásban. Az egykor bakteriális szerkezeteket tartalmazó minták stabil szénizotópos értékei mintegy 0,5-1 ‰-es pozitív irányú eltérést mutattak társaiktól. A ma is megfigyelhető karbonátképződés kiváló alkalmat kínált az oldott karbonátot hordozó víz, valamint a képződő édesvízi mészkő közötti izotóp frakcionációs folyamatok tanulmányozására. A minták geokémiai, stabilizotóp-geokémiai vizsgálata alapján a hazánkban egyedülálló képződmény, mint modellanyag példáján pontosították a kinetikus frakcionációs folyamatokat, a CO₂ kigázosodását, a kőzet-víz kölcsönhatást és a párolgás folyamatait. Az eredmények alkalmazásának fő területe az édesvízi stabilizotóp-rekordok értelmezése, a recens folyamatok megértéséből a fosszilis mészkövekbe zárt információ kinyerésére.

Tovább vizsgálták a budai Vár-hegy édesvízi mészkövében található *paleotalaj* másodlagos karbonátfázisait. Kimutatták, hogy a talajkarbonátok legnagyobb mennyiségben jelenlévő típusa, a tús-szálal megjelenésű kalcit gombákhoz kötődő biomineralizáció eredménye (stabil szén- és oxigénizotóp-eredmények). A paleoklimatológia komplex kutatását 10 fős magyar kutatócsoport végezte, melyből 4 kutató tartozott a GKL állományába. Az intézeti ráfordítás közel 6 millió Ft volt, ebből kb. 3,3 millió Ft volt a pályázati forrásból elnyert támogatás.

Az *ivóvízbázisok védelme* témakörben *izotóp-hidrogeokémiai* módszerekkel 2004-ben is folytatódott a Budapest vízellátásában résztvevő Csepel-szigeti parti szűrésű sekély vízáadó vízének eredetvizsgálata, elsősorban az előző években kimutatott negyedik komponens, a föláramló idős víz jellemzése. Kormeghatározási vizsgálatok és stabilizotópos elemzések segítségével megállapították, hogy a föláramló idős víz a legutóbbi eljegesedési maximum (LGM) során, a kb. 16-30 ezer évvel ezelőtti időszakban szivárgott a felszín alá, majd a horizontális áramlási viszonyokat jelentősen módosítva a sziget területén áramlik felfelé. Az

eredmények hozzásegítenek, hogy a közel 2 millió lakost ellátó Budapesti Vízművek Rt. egyik ivóvízbázisán a védőterületek kijelölése az eddigieknél pontosabb és megbízhatóbb legyen, ezáltal is javítva a szolgáltatott víz minőségének folyamatos biztosítását.

Dél-budai *keserűvíz-telepek ásványtani és geokémiai vizsgálatai* a keserűvizek képződésének megismeréséhez segítették közelebb a szakembereket. Kimutatták, hogy a gipsz jellegzetes indexásványa a keserűvíznek, továbbá, hogy az uralkodó agyagásvány, a szmektit rétegek közötti kationja a mélységgel változik, és a feláramló vizek kemizmusával van összefüggésben.

A nagy szerves anyag tartalmú hévizek molekuláris összetételének vizsgálata témában a fenantrén/antracén hányados, mint fontos termálvíz fácies jelző mutató felismerése jelentett nagy előre lépést. A hidrogeokémia komplex kutatását 3-5 fős magyar kutatócsoportok végezték, ezekből 3 fő tartozott a GKL állományába. A becsült intézeti ráfordítás közel 25 millió Ft volt, ebből kb. 1 millió Ft volt a pályázati forrásból elnyert összeg.

A kulturális örökség (régészeti leletek) geoarcheológiai (archeometriai) vizsgálata témakörben az alábbi eredmények születtek. Népvándorlás kori - zalavári - kerámiák nyersanyaglelőhelyét határozták meg soványító anyagaik eltérő ásvány-kőzettani, geokémiai jellegének kimutatásával. Bizonyították kétféle származási helyüket, és meghatározták az előállítás technológiai paramétereit is. A Szépművészeti Múzeum Antik Gyűjteményéből vizsgált Augustus fejről megállapították, hogy anyaga egy elemi kén geoda. E tárgyban egy háromdimenziós üreges tárgy kialakításának speciális megoldását, speciális anyaghasználatát szemléltették, ami a maga nemében nemcsak egy szobor, hanem épségét és méretét tekintve technikatörténeti kuriózum is. A fém burkolat megsemmisült az idők folyamán. A „külső héj” nyomai nem lelhetők fel a tárgyon, de ez minden bizonnyal arany lehetett. Lehetséges, hogy a múzeumi gyűjteményekben több ilyen tárgy is létezik, de küllemük alapján könnyen félreértelmezhető anyagaik miatt (fajansz, stb.) esetleg eredeti funkciójuk is rejtve maradt. A geoarcheometria komplex kutatási irányt 8 fős nemzetközi kutatócsoport végezte, melyből 7 fő volt magyar, és 4 kutató tartozott a GKL állományába. Az intézeti ráfordítás közel 4 millió Ft volt.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A filloszilikátok kőzetgenetikai vizsgálatát, valamint a diagenetikus-metamorf folyamatok kutatását szerteágazó, informális valamint formális nemzetközi és hazai együttműködések keretében végezték. Magyarországon a GKL munkatársai elsősorban az MTA Atommagkutató Intézetével, a Magyar Természettudományi Múzeum Ásvány- és Kőzettárával, valamint a Magyar Állami Földtani Intézettel működtek együtt. E témakörben nemzetközi kapcsolatot a Horvát Tudományos és Művészeti Akadémiával a 2004-2007 közötti időszakra is megújított bilaterális együttműködési szerződés keretében tartottak fenn. Az együttműködés keretében két magyar kutató 1 hetes terepi munkán vett részt Horvátországban, a műszeres vizsgálatokat a GKL-ben végezték. A GKL igazgatója az International Union of Geological Sciences Subcommission on Systematics of Metamorphic Rocks (IUGS-SCMR) tagja, a kis hőmérsékletű metamorf képződményekkel foglalkozó nemzetközi munkacsoport vezetője. Informális nemzetközi együttműködések alapuló metamorf kőzetgenetikai kutatásokat folytattak a következő intézetekkel: Michigani Egyetem (Ann Arbor, USA), Johns Hopkins Egyetem (Baltimore, USA), Granadai Egyetem

(Spanyolország), Padovai Egyetem (Olaszország), Gráci Karls-Franzens-Egyetem (Ausztria), Krétai Műszaki Egyetem (Chania, Görögország), Negevi Ben Gurion Egyetem (Beer Sheva, Izrael). A Kárpát-medence alatti köpenyrégió stabilizotópos vizsgálata során a Természettudományi Múzeum, az MTA-ELTE Geológiai Tanszéki Kutatócsoport, a Római, a Tübingeni és a Müncheni Egyetem kutatóival működtek együtt. A Szerb Tudományos és Művészeti Akadémiával „Geochemistry and mineralogy of REE and Ni in different geological environment” témában folytattak közös kutatómunkát. A La Lagunai Egyetem kutatóival közös Tét kutatási projekt keretében a Kanári-szigetek vulkanizmusát tanulmányozták. A kutatási projekt keretében két magyar és egy spanyol kutató töltött 2-2 hetet a projektben szereplő partnerintézményekben. A magyar kutatók terepi munka során vizsgálták a Fuerteventura Basal Complex összletében a projekt végrehajtása során felfedezett és a világon egyedülálló migmatitosodott karbonatit testeket. A spanyol kutató magyarországi tartózkodása során ezek mintavételezése és mikrokémiai valamint stabilizotópos elemzése történt meg.

Informális alapú közös kutatásokat végeztek a madridi, a müncheni, a tübingeni, a szentpétervári egyetemek, valamint a Birkbeck College (London), Memorial University of Newfoundland (St. John's) és a bécsi Naturhistorisches Museum kutatóival a köpenyeredetű kőzetek nyomelem- és stabilizotóp-geokémiai vizsgálatában.

Az üledékes kőzetek szervesgeokémiai vizsgálatában a Szegedi Tudományegyetem és a MÁFI munkatársaival működtek együtt. A mangán-kutatás területén az ELTE, a Szegedi Tudományegyetem és a MÁFI kutatóival konzultáltak. Az izotópsztratigráfiai-paleoklimatológiai tanulmányok az ELTE, a MÁFI, a Veszprémi Egyetem és az MTA-MTM Őslénytani Kutatócsoport kutatóival közös kutatómunka keretében folytak. A magyarországi paleotalajokat a Szent István Egyetemmel, a szerves anyagok termikus degradációját és ezek agyagásványokkal való kölcsönhatását a Szegedi Tudományegyetemmel együttműködésben tanulmányozták. A Budapest vízellátásában jelentős szerepet betöltő parti szűrősű vízbázisok vizei eredetének és az áramlás dinamikájának kutatását a VITUKI, az ELTE és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem kutatóhelyeivel közösen végezték. A hévizek szervesanyag-tartalmának kutatásában az OKK OKI szakembereivel működtek együtt. Az ókor és a középkor művészettörténetében jelentős szerepet játszó, márványból készült műtárgyak anyagainak eredet-meghatározását a Kulturális Örökségvédelmi Hivatallal és az ELTE Közettan-Geokémiai Tanszékével együttműködve végezték.

A hazai kapcsolatok terén megemlítenéd, hogy az MTA FKK GKL-ben tevékenykedő főigazgatója egyben az MTA X. Földtudományi Osztályának elnöke, az MTA elnökségének tagja. A GKL igazgatója tagja volt az MTA Doktori Tanácsának, az MTA Matematikai és Természettudományi Kuratóriumának és jelenleg is tagja az Országos Akkreditációs Bizottság Föld- és Környezettudományi Szakbizottságának. Négy munkatárs tagja az MTA Geokémiai és Ásvány-Kőzettani Tudományos Bizottságának, egyikük a bizottság titkára. Egy munkatárs tagja az MTA Környezetgeokémiai, kettő a Szerves Geokémiai Tudományos Albizottságainak, egyikük az utóbbi elnöke. Egy-egy munkatárs tagja a Geonómiai Tudományos Bizottság Geonómiai Albizottságának, az ELTE TTK Földrajzi-Földtudományi Szakterületi Habilitációs Bizottságának, az ELTE TTK Földtudományi Professzori Tanácsának, a Magyar Geológiai Szolgálat Tudományos Tanácsának, egy kutató a Magyarhoni Földtani Társulat tiszteletbeli tagja, két kutató tagja a Magyarhoni Földtani Társulat Választmányának, az Agyagásványtani Szakosztály és a Tudománytörténeti

Szakosztály vezetőségének. Egy kutató az MTA Bolyai János Ösztöndíj Szakértői Kollégiumának tagja, az OTKA Élettelen Természettudományi Szakkollégium Földtudomány I. zsűri tagja. Tagként részt vesznek az *Acta Geologica Hungarica*, az *Acta Mineralogica-Petrographica* és a *Környezetvédelmi Lexikon* szerkesztő bizottságainak munkájában is.

Az MTA FKK főigazgatója "foreign member"-ként a Szerb Tudományos és Művészeti Akadémia tagja. A GKL igazgatója az International Union of Geological Sciences (IUGS) Magyar Nemzeti Munkacsoport elnöki tisztét tölti be, a *Schweizerische Mineralogische und Petrographische Mitteilungen* (Zürich) nemzetközi folyóirat szerkesztő bizottságának tagja. Egy-egy kutató az IUGS Subcommission on Data Bases for Petrology titkára, az IUGS Nemzetközi Földtudomány Történeti Bizottságának (INHIGEO) tagja, valamint az International Association of Geochemistry and Cosmochemistry titkára. Két kutató a European Society for Isotope Research Advisory Board tagja. A GKL egy munkatársa részt vesz "A Kárpát-medence neogén vulkanizmusa geokronológiai térképe" nemzetközi ad hoc bizottság munkájában.

Kapcsolat felsőoktatási intézményekkel

A GKL három vezető munkatársa a Szegedi Tudományegyetem, illetve az ELTE Doktori Iskolának akkretidált és alapító külső tagja, igazgatója egyetemi magántanár a Szegedi Egyetemen, földtudományi szakon. Négy munkatárs az ELTE TTK geológus és PhD képzését segítve doktori és speciális kollégiumokat tartott, PhD munkák témavezetője. Egy további munkatárs a Szegedi Egyetemen és a Magyar Képzőművészeti Egyetemen, nappali tagozaton speciális kollégiumokat tart.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A beszámolási évben a GKL kutatói 8 OTKA pályázatban voltak témavezetők. A beszámolási évben elnyert OTKA pályázatok a következők:

A Metamorfózis és a tektonikai deformáció összefüggéseinek vizsgálata című ifjúsági OTKA pályázat szervesen kapcsolódik az intézetben hosszú évtizedek óta folyó metamorf petrogenetikai kutatásokhoz. A pályázat 4 éve alatt különböző metamorf fokú és eltérő deformáltságú litológiai egységek vizsgálatát végzik. A fenti feltételek mellett a kőzetkémizmus metamorfózisra és tektonikai deformációra hatását is tanulmányozzák. Az *Ásványtani és geokémiai vizsgálatok karbonátokon, különös tekintettel talajok-paleotalajok és metamorf kőzetek karbonátfázisaira* elnevezésű OTKA posztdoktori pályázat lehetővé teszi egy PhD-val rendelkező fiatal kutató foglalkoztatását a beszámolási évben. A pályázat maximum 3 évre hosszabbítható meg. Emellett nagyban hozzájárul a kutató kutatásainak anyagi fedezéséhez.

A Nemzeti Fejlesztési Terv Gazdasági Versenyképesség Operatív Program keretében 2004 legvégén 57.937.500 Ft-ot nyert el a GKL „Vivógáz stabilizotópmérő tömegspektrométer és feltáró berendezések (víz- és karbonátfeltáró) beszerzése és laboratóriumi kiépítése” pályázattal. A projekt 2005. február 28-án indul. A laboratóriumi fejlesztés megvalósulásával a hazai geokémiai kutatás igen fontos, a tudomány élvonalába tartozó laboratóriumi lehetőséggel bővül.

**V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak
és más bemutatható eredmények**

1. Árkai P, Livi KJT, Frey M, Brukner-Wein A, Sajgó Cs White micas with mixed interlayer occupancy: a possible cause of pitfalls in applying illite Kübler index („crystallinity”) for the determination of metamorphic grade. *European Journal of Mineralogy* 16: 469-482, 2004
2. Demény A, Sitnikova MA, Karchevsky PI Stable C and O isotope compositions of carbonatite complexes of the Kola alkaline province: phoscorite-carbonatite relationships and source compositions. In: Wall F., Zaitsev AN (Editors), *Phoscorites and Carbonatites from Mantle to Mine. The Mineralogical Society Series* 10: 407-431, 2004
3. Maruoka T, Kurat G, Dobosi G, Koeberl C Isotopic composition of carbon in diamonds of diamondites: Record of mass fractionation in the upper mantle. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 68: 1635-1644, 2004
4. Sipos P Geological and pedogenic effects on heavy metal distributions in forest soils from the Cserhát Mts. and the Karancs area, NE Hungary. *Acta Geologica Hungarica* 47: 4; 411-429, 2004

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Földtudományi Kutatóközpont, Geokémiai Kutatólaboratórium

Átlaglétszám ¹ :	35	Ebből kutató ² :	18
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			7
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			33
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			32
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	15	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	4
nemzetközi együttműködés keretében:	12	SCI által regisztrált folyóiratban:	11
összesített impakt faktor:	18,335	összes hivatkozás száma ⁴ :	310
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			215
Megjelent könyv:	1	könyvfejezet:	- jegyzet: -
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	- jegyzet: -
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	20	poszterek száma ⁶ :	17
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		139,237 MFt	
Beruházási támogatás:	- MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	2
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			8
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,385 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			6
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,92 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,4 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			-
EU forrásból:		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb:		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			0,34 MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Földtudományi Kutatóközpont, Geokémiai Kutatólaboratórium

„A hulladékok optimális elhelyezésének lehetőségei (Magyarország környezetföldtani és földrajzi adottságainak értékelése hulladékelhelyezés szempontjából)” című NKFP OM 3/053/2001 ny. sz. projekt keretében az MTA Geokémiai Kutatólaboratóriuma 2004 során kiválasztott modellterületek földtani közegeinek geokémiai értékelését végezte el. A tanulmány a geológiai minták alapvető ásvány-kőzettani elemzése mellett a fontosabb kőzettípusok szorpciós vizsgálatát is célul tűzte ki. Az elemzések célja annak meghatározása volt, hogy a kommunális hulladékokból felszabaduló, nagy környezetterhelést jelentő szennyező elemek migrációjával szemben a kiválasztott területeket felépítő kőzetek, illetve laza üledékek milyen tulajdonságokat mutatnak. Hét mintaterületen mélyített fúrások anyagának feldolgozása során az alkalmasságot alapvetően befolyásoló agyagásványok és karbonátok minőségének és mennyiségének meghatározását, majd a kommunális hulladékelhelyezésre alkalmas helyszínek kijelölését végezték el. Laboratóriumi kísérletek alapján a kiválasztott helyszínek kőzeteinek és laza üledékeinek abszorpciós kapacitása $Cr >> Cu > Zn > Cd \approx Ni$ sorrendet mutatott, bár az egyes, ásványos összetétel alapján alkalmasnak tekinthető helyszínek között is jelentős különbség mutatkozott a megkötő képesség tekintetében.

Az NKFP OM 3/016/2001 ny. sz. „Magas hatásfokú, hosszú élettartamú, környezetbarát, nagyintenzitású kisülőlámpák kifejlesztése” elnevezésű kutatási program fő céljai a jobb fényhasznosítás és a még hosszabb élettartam elérése voltak. Ezekben a kérdésekben jelentős szereppel bír a katódra felvitt elektron emissziós anyagok minősége, és ezek katóddal való kölcsönhatása. Az emittív anyag égetés során történő degradációjának feltárással meghatározták a különböző módon adalékolt emittív anyagok stabilitását, hatását a fényáram csökkenésére, valamint lehetővé vált az új típusú emittív anyag kifejlesztése. A HPS típusú lámpák kutatása során kifejlesztett új típusú emittív anyag tudományos igényű meghatározásában, finomszerkezeti vizsgálatokat (XRD, TEM, elektrondiffrakció) végeztek, és meghatározták az új anyag kristályszerkezeti paramétereit. Alapvetően hozzájárultak a gyártási folyamat módosításához, lehetőséget teremtve az emisszió javítására, a kilépési munka és a katód működési hőmérsékletének csökkentésére, a lámpák élettartamának növelésére.

2004-ben indult meg a Mecsek-hegység területén az ún. Bodai Aleurolit Formáció, mint *a nagy radioaktivitású hulladékok elhelyezésére* kiválasztott képződmény intenzív ásvány-kőzettani kutatása. Ebben a társadalom és a gazdasági élet számára kiemelten fontos nemzeti kutatási programban az MTA GKL - felhasználva a 90-es évek során elért alap- és alkalmazott kutatási eredményeit – komplex műszeres anyagvizsgálatokkal és értékeléssel vesz részt.

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67; 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 325-9040, Fax: 325-5990
e-mail: palg@chemres.hu; honlap: <http://www.chemres.hu>

Biomolekuláris Kémiai Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 325-9040, Fax: 325-5990
e-mail: palg@chemres.hu

Felületkémiai és Katalízis Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 325-9040, Fax: 325-5990
e-mail: palg@chemres.hu

Szerkezeti Kémiai Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 325-9040, Fax: 325-5990
e-mail: palg@chemres.hu

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel: 325-7896, Fax: 325-7892
e-mail: szepvol@chemres.hu

Izotópkutató Intézet

1121 Budapest, Konkoly T. u. 29-33.
(1525 Budapest, Pf. 77.)
Tel.: 392-2531, Fax: 392-2533
e-mail: wojn@alpha0.iki.kfki.hu

A kutatóközpont fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóközpont fő feladata a kémia és a vele rokon szaktudományok (elsősorban az élettudományok és a fizika) fontos területein olyan alapvető és nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása, amelyek nagyobb létszámú kutatócsoportok összehangolt tevékenységét és korszerű nagyműszeres módszerek koordinált alkalmazását igénylik.

A kutatóhely fontos feladata továbbá az egyetemi oktatómunkában és a posztgraduális képzésben való részvétel.

A központ tevékenységében lényeges szerepük van a gyakorlati célokat szolgáló kutatási programoknak. Ebből a szempontból kiemelkedő jelentősége van a 2004-ben elnyert, „Kémia az életminőség javításáért” c. (GVOP) kooperációs kutatóközpont pályázatnak.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2004. évi tudományos kutatásait a *funkcionális anyagok kémiai kutatásának* tematikája foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

- Biomolekuláris és szerves kémiai kutatások
- Felületkémiai és katalízis kutatások
- Szerkezeti kémiai és reakciókinetikai kutatások
- Anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások
- Nukleáris kémiai kutatások.

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont

Átlaglétszám ¹ :	453	Ebből kutató ² :	252
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			109
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			340
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			336
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	242	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	3
nemzetközi együttműködés keretében:	104	SCI által regisztrált folyóiratban:	233
összesített impakt faktor:	345,837	összes hivatkozás száma ⁴ :	3675
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			3098
Megjelent könyv:	2	könyvfejezet:	47
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	15	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	2	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	164	poszterek száma ⁶ :	169
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			64
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	32	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	33
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		1.900,168 MFt	
Beruházási támogatás:	26,462 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	4
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			68
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	79,267 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			76
NKFP:	11	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	242,783 MFt
Egyéb:	65	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	202,951 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			17
EU forrásból:	15	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	125,397 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,792 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			13
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	15,554 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			27,973 MFt

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézetben folyó kutatások - a korábbi évekhez hasonlóan - 2004-ben is az anyagtudomány és a környezeti kémia egyes tudományos problémáinak felderítésére irányultak. A fő területeken belül ugyanakkor folyamatosan korszerűsítik művelt témáikat.

Anyagtudományi kutatásaikban az anyagok összetétele, szerkezete, tulajdonságai és előállítási módszerei közötti összefüggések kémiai részleteinek feltárására törekedtek, célszerűen választott funkcionális és szerkezeti anyagok esetében. A tanulmányozott modellek között egyre nagyobb részt képviselnek a nanoszerkezetű rétegek és tömbi anyagok, valamint a biológiai-orvosbiológiai vonatkozású anyagi rendszerek.

Környezeti kémiai kutatásaik olyan fizikai-kémiai és kémiai összefüggések felderítésére irányultak, amelyek elősegítik a természeti környezetet az eddigieknél kisebb mértékben terhelő új termékek és eljárások megalapozását és kifejlesztését.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Anyagkémiai kutatások

NKFP projekt keretében izületi endoprotézisekben alkalmazott, ultra-nagy molekulatömegű polietilént kezeltek különféle ion- és atomsugarakkal, a kopásállóság javítására céljából. Összefüggést találtak a kopásállóság és az elektronspektroszkópiai úton meghatározott, ún. C1s plazmonvesztési energia között.

Száraz levegőben végzett, plazmaimerziós ionimplantációval (PIII) megjavították titán-ötözetek és alumínium-tartalmú titán-ötözetek keménységét és kopásállóságát. Az észlelt hatásokat az alumínium felületi szegregációjával és oxidált, titán- és alumínium-tartalmú felületi réteg kialakulásával magyarázták. Ugyanezen anyagok nitrogénben végzett PIII kezelésekor nem tapasztaltak szegregációt, viszont titán-nitrid képződött a minta felületén.

Folytatták az XPS mérések kvantitatív kiértékelésének fejlesztését. Befejezték a CNx típusú rétegek tulajdonságainak jellemzésére irányuló kutatásokat. OTKA pályázat keretében megkezdték szén-alapú nanokompozit rétegek és szilícium-tartalmú DLC-rétegek növesztését és vizsgálatát.

Aromás poliimidet kobalt- és vas-ionokkal, nagy dózisban bombázva, elszenesedett polimer-mátrixból és fémrészecskékből álló nanokompozit rétegek képződését mutatták ki. XPS vizsgálataik szerint ezekben a rétegekben a vas oxidként, míg a kobalt fémes és oxidos állapotban van jelen. A kapott eredmények alapján a polimerek átmenetifém ionokkal történő bombázása alkalmas módszer lehet különleges tulajdonságú nanokompozitok előállítására.

Vizsgálták fullerének termikus plazmában történő előállítását, különböző korom- és grafit-porokból kiindulva. A vizsgálatok célja a fullerénképződés mechanizmusának és kinetikájának megismerése és az előállítási körülmények hatásának felderítése volt. Megállapították, hogy a kiindulási anyagok szemcseméretén túlmenően a korom- és grafit szemcsék hővezető képessége is nagymértékben befolyásolja a plazmában lezajló folyamatokat. Ennek oka, hogy a hővezető képesség (ami szoros kapcsolatban van a szerkezeti rendezettséggel) határozza meg a szemcsék elpárolgásának mértékét. Ezzel magyarázható, hogy fullerének termikus plazmában történő előállításához nem a kis szemcseméretű, amorf szerkezetű korom, hanem az 1-10 μm szemcseméretű, rendezett szerkezetű grafit a megfelelő kiindulási anyag. Az eddigi legkedvezőbb esetben 6 %-os fullerén kihozatalt értek el, ami közel másfélszerese az eddig alkalmazott előállítási módszereknél elért kihozatalnak. Az RF termikus plazmában kapott fullerén elegyben a $\text{C}_{60}/\text{C}_{70}$ arány 2,6 volt, és több magasabb szénatom-számú fullerént (pl. C_{84} -et) is kimutattak a termékek között. Felvázolták a fullerén képződés mechanizmusát, adott körülmények között. A fullerén kihozatal, a reakciókörülmények további javításával, várhatóan növelhető. Jó esély van arra, hogy a korábbinál termelékenyebb és gazdaságosabb módszert dolgozzanak ki nagyobb molekulatömegű fullerének előállítására, ami lehetővé teszi a fullerének eddiginél szélesebb felhasználását.

Tanulmányozták szerkezeti és funkcionális kerámiák előállítására alkalmas, nanoszemcsés porok, így cink-oxid és cink-ferritek, illetve cink-ferro-ferritek előállítását, termikus plazmában. Meghatározták a termékek összetételét és morfológiáját befolyásoló műveleti paramétereket, a kívánt összetételű, komplex oxidok kialakításának feltételeit, valamint az ún. inverz spinellek szintézisének legcélszerűbb körülményeit. A kapott, nagy tisztaságú, nanoszemcsés porokból újszerű, különleges optikai, elektromos vagy mágneses tulajdonságú kerámiák készíthetők.

Eljárást dolgoztak ki új típusú, hiperelágazásos polimerek szintézisére, a kvázi-élő, gyökös polimerizáció törvényszerűségeinek alkalmazásával. A kapott anyagok szerkezetének felderítésével és oldatainak vizsgálatával igazolták a nagyszámú funkciós csoporttal rendelkező, hiperelágazásos polimerek létrejöttét. E polimerek alkalmasak lehetnek molekuláris kapszulázásra, nanorészecskék szintézisére, új típusú polimer keverékek és térhálósító adalékok előállítására és a gyógyszerkémiában is várhatóan széles körben használhatók fel.

Az utóbbi időben világszerte igen intenzív kutatások folynak a szupramolekuláris rendeződésre képes, szintetikus polimerekkel kapcsolatban. Az intézetben - nemzetközi együttműködésben - egy új szupramolekuláris polimer rendszert állítottak elő tökéletes láncvégi funkcionálissal rendelkező poliizobutilénből kiindulva, kvázi-élő karbokationos polimerizációval. A kapott poli-izobutilén-polietilén-oxid blokk-kopolimerek a teret szabályosan kitöltő micellákat tartalmaztak. Ezeket templátként alkalmazva, nanoméretű, üreges szilícium-dioxid és titán-dioxid szemcséket állítottak elő. Az így készített, rendkívül nagy fajlagos felületű anyagok számos területen előnyösen használhatók fel.

Számottevő eredményeket értek el az amfifil polimer kotérhálók nanofázisú morfológiájának felderítésében. A világon elsőként állítottak elő széles összetétel-tartományban olyan amfifil kotérhálókat, amelyek jellemző mérete 3-20 nm közé esik. Különböző, egymástól független szerkezetkutató módszerekkel tanulmányozták az összetétel és a morfológia közötti összefüggéseket ezeknél az anyagoknál. Megállapították, hogy ezek az alkotó fázisok nanoméretben különülnek el egymástól és az összetevők térbeli elrendeződése nagymértékben függ az összetételtől. Az ilyen polimer kotérhálók - szemben a hasonló jellegű, két- és többkomponensű polimerekkel - széles összetétel tartományban megőrzik különleges morfológiájukat. Ez számos nanotechnológiai alkalmazást tesz lehetővé.

Folytatták a polimerek környezeti lebomlásával és stabilizációjával foglalkozó kutatásaikat. Megállapították, hogy egyes fenolos antioxidánsok hidrolitikus stabilitása nemcsak a modellkísérletek körülményei között, hanem az iparilag feldolgozott polietilén csövekben is kicsi és erősen függ a stabilizátor kémiai szerkezetétől. A kutatás elméleti és gyakorlati szempontból is fontos, mivel a modellként választott, nagysűrűségű polietilén egyik legnagyobb felhasználója a csőgyártás. A vízzel érintkező polietilén csövekben levő stabilizátorok sorsa egyelőre nem ismert, bár ennek jelentős egészségügyi és környezetvédelmi vonatkozásai vannak.

Heterogén polimer rendszerek tanulmányozása kapcsán vizsgálták a PP/PIB keverékek szerkezete és tulajdonságai közötti kapcsolatokat. Megállapították, hogy a komponensek kölcsönös oldhatósága különbözik, ami az összetétel függvényében érdekes szerkezetek kialakulásához és ennek megfelelő tulajdonságokhoz vezet. Részletesen vizsgálták a töltőanyagok felületi jellemzőinek meghatározására alkalmas módszereket. Az egyik leggyakrabban alkalmazott ilyen eljárás az inverz gázkromatográfia. Irodalmi adatok, valamint saját méréseik alapján megállapították a módszer buktatóit és korlátait, eljárást javasoltak a felületi jellemzők megbízható meghatározására.

Jelentősen előrehaladtak a delaminációval előállított, rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Különböző mátrixú nanokompozitok vizsgálatával megállapították, hogy a rétegszilikát mindig csak részlegesen delaminálódik. A feldolgozás során bonyolult szerkezet alakul ki, ami eredeti szemcséket, a polimer által duzzasztott szilikát egységeket és delaminált egyedi lemezeket egyaránt tartalmaz. Nagy szilikáttartalomnál kártyavárszerű szerkezet is kialakulhat. A delamináció mértékét a komponensek kölcsönhatása és kinetikai tényezők határozzák meg; a szerkezet mennyiségi jellemzése azonban még nem megoldott. Egyértelműen bizonyították, hogy poliamid nanokompozitok tulajdonságait jelentősen befolyásolják a határfelületi kölcsönhatások.

Folytatták a biológiailag lebontható műanyagok előállítására és a természetes alapanyagok felhasználására irányuló kutatásaikat. Befejezték a cellulóz savas és enzimés bontási kísérleteit, amelyek célja az volt, hogy a bomlástermékeket alifás poliészterrel kombinálva, biológiailag lebontható műanyagot állítsanak elő. Megállapították, hogy mind a savas, mind az enzimés bontás nagyon kis polimerizáció-fokú termékekhez vezet, amelyekkel az eredeti célt nem lehet elérni. Ennek megfelelően módosították a kutatás irányát és a cellulóz kémiai lágyításának lehetőségeit kezdték tanulmányozni. Természetes erősítőanyagok felhasználásával módosított polipropilén társított anyagokat állítottak elő; ezekből használati tárgyak és akusztikus eszközök állíthatók elő. Vizsgálták, hogy a kompozit tulajdonságai miként függenek a komponensek típusától, valamint a határfelületi kölcsönhatásoktól. Megállapították, hogy kombinált, reaktív/nem-reaktív felületkezeléssel jelentősen növelni lehet a szilárdságot. Az erősítőanyag mennyiségének növelése ugyanakkor lerontja a feldolgozhatóságot.

Elektrokémiai kutatásaik során iparilag használható foszfátosó fürdőt fejlesztettek ki. A fürdőben kis porozitású, nanométer vastagságú bevonatok alakíthatók ki horganyfelületeken. Az új eljárással kiküszöbölhetők azok a környezetre ártalmas, kromatózási eljárások, amelyeket eddig a karosszériaelemek gyártására használt, tűzihorganyzott vaslemezek korrózióvédelmére alkalmaztak.

Réz-alumínium fém-pár korróziós sajátságainak vizsgálatokor megállapították, hogy a rézionok, illetve az alumíniummal galvanikus kapcsolatban lévő fémréz gyorsítja a korróziót; a hatás nagymértékben függ az alumínium felületének állapotától. Utóbbi már viszonylag rövid ideig tartó, forró desztillált vízben végzett előkezeléssel is jelentősen módosítható.

Klorid-ionok és hidrogén-szulfát-ionok specifikus adszorpciójának radioaktív nyomjelzéses vizsgálatával bepillantást nyertek a vas, kobalt és mangán korróziója során bekövetkező határfelületi jelenségekbe. Megállapították, hogy a klorid- és szulfát-ionok adszorpció más és más pH tartományban játszódik le. A jelenséget azzal magyarázták, hogy a kétféle ion különböző erősséggel kötődik meg oxidált, illetve tiszta fémfelületen.

Iridium (111) egykristályon végeztek elektrokémiai vizsgálatokat. A voltammetriás módszerrel és a kettősréteg-kapacitás mérésével kapott elektródpotenciál görbéket hasonlónak találták a platina (111) elektródokon mérhetőkhöz.

Nagyérzékenységű, mintegy 0,1 pA felbontású elektrokémiai mérőberendezést (ún. bipontenciosztátot) fejlesztettek ki nanorések kialakításához, és az így létrehozott résekben a molekuláris vezetőképesség méréséhez.

Új módszert dolgoztak ki vas(III)-poligalakturonát komplexek molekulatömegének meghatározására. A módszer lényege, hogy a láncvégi cukormolekula nem egyszerűen komplexet képez a vas(III)-ionokkal, hanem a gyűrű felhasadása révén redoxireakcióba is lép vele, miközben a vas(III) vas(II)-vé redukálódik. A redoxireakció kvantitatív és felhasználható a láncvégződés számának meghatározására. Utóbbiból kiszámolható a cukormolekulák száma, majd az átlagos molekulatömeg. A vas(III)-poligalakturonát komplex átlagos tömegének ismerete az élő szervezetben történő vasszívódás szempontjából fontos.

Gyógynövénykutatásaik során elsőként írták le az illóolajok és komponenseik antioxidáns tulajdonságát, redukáló képességük meghatározása alapján. Összefüggést találtak a redukáló képesség és a molekula szerkezete között: megállapították hogy a nagyobb redukáló képességű illóolaj komponensek delokalizált elektron szerkezetűek. Kimutatták, hogy az illóolajok redukáló képessége nagyobb, mint az illóolaj komponenseké; a redukáló képesség tehát nem köthető kizárólag a terpénekhez, hanem azt a jelenlévő egyéb vegyületek is befolyásolják.

Környezatkémiai kutatások

Nagyteljesítményű folyadékromatográfiás HPLC/APCI-MS és MALDITOFMS módszert dolgoztak ki növényolajok gyors elemzésére és eredetének vizsgálatára, a triglicerid összetétel alapján.

Tanulmányozták környezetszennyező anyagok kötődését egyes növényi fehérjékhez. Meghatározták, hogy a vizsgált szennyező molekulák (növényvédőszerke bomlástermékei, oldószerke, felületaktív anyagok) lipofil jellege és sztereokémiai viszonyai hogyan befolyásolják a kialakuló kölcsönhatások erősségét. Bizonyították a Trucker-3 modell alkalmazhatóságát nagy kromatográfiás adatmátrixok értékelésére.

Számos, elsősorban környezetvédelemhez és ipari korrózióvédelemhez kapcsolódó analitikai feladatot oldottak meg hazai iparvállalatok és kutatóhelyek megbízásai alapján.

Módszert dolgoztak ki a műanyag hulladékok pirolízisekor kapott olajok finomítására használt katalizátorok gyors és egyszerű tesztelésére. Megállapították, hogy a katalizátorok aktivitása a felületükön lerakódó szén miatt csökken. A lerakódás, levegőben történő hevítéssel, teljes mértékben eltávolítható, egyéb módszerekkel a katalizátorok aktivitását nem lehet visszaállítani. Az eredmények arra utalnak, hogy az elektronikai hulladékok technológiai méretben is környezetkímélő módon hasznosíthatók.

Vizsgálták brómozott égésgátlók pirolitikus bontását kalcium-karbonát - szén adalékelegy jelenlétében. Ezzel az adalékkal a polimerekből keletkező, folyékony pirolízis termékekben levő halogének jó hatásfokkal megköthetők.

Folytatva korábbi kutatásaikat, megállapították, hogy a poli(vinil-klorid), a világon harmadik legnagyobb mennyiségben gyártott polimer az ipari gyártásnál mindig alkalmazott stabilizátorok jelenlétében is lebontható, oxidáló körülmények közötti kezeléssel. Kimutatták, hogy az általuk korábban kidolgozott oxidációs módszer ön-stabilizátorok jelenlétében is a PVC láncok jelentős tördelődését eredményezi, és kisebb molekulatömegű, oxidált szerkezeteket tartalmazó polimer láncok képződnek. Ez lehetőséget teremt a PVC másodlagos újrahasznosítására olyan területeken is, ahol az eredeti PVC - szerkezete miatt - nem alkalmazható.

Vizsgálták egyes, nagy mennyiségben előforduló veszélyes hulladékok – égetőműi pernye, kohászati hulladékok stb. – plazmatechnológiával történő ártalmatlanításának, illetve másodlagos nyersanyagként történő felhasználásának lehetőségeit, a plazmatechnológia környezetvédelmi célú hazai bevezetésének megalapozása céljából. A kutatások során fontos szempont, hogy a kidolgozandó eljárás ne csak a hulladékok ártalmatlanítására, hanem azok értékes terméké történő átalakítására is alkalmas legyen. Így nemcsak kisebb környezetterheléssel lehet számolni, hanem az eljárás bevezetésével gazdasági haszon is realizálható.

A téma eddigi művelése során analitikai módszereket dolgoztak ki égetőműi pernyék, kohászati szállóporok és iszapok szerves és szervetlen összetevőinek minőségi és mennyiségi meghatározására. Termodinamikai számításokat végeztek poliklórozott szénhidrogének és származékaik esetében a termikus plazmában végzett hőbontás mértékének előrejelzésére, és a várható egyensúlyi összetételek meghatározására. Ugyancsak termodinamikai számítások alapján meghatározták a vizsgált szerves hulladékok termikus plazmában végzett olvasztása során létrejövő fázisokat. Mintavételi módszert és elemzési eljárást dolgoztak ki a plazmareaktorból kilépő gázáram összetételének meghatározására.

Vizsgálták a víztisztító kapacitás bővítésének lehetőségeit Garé és Hidas térségében, ahol a korábban lerakott és nem megfelelően tárolt, 16000 tonna vegyes poliklór-benzol hulladék súlyos talaj- és talajvízszennyezést okozott. Kombinált reaktort fejlesztettek ki a szennyezett talajvíz előtisztítására, ezáltal a meglévő víztisztító üzem áteresztőképességének jelentős növelésére. A reaktor a következő feladatokat látja el:

- nappal - napenergia felhasználásával - a klórbenzolokat mozgó folyadékfázisban, fotokatalitikus reakcióban oxidálja,
- éjjel-nappal működve, ellenáramú levegővel sztrippeli a mozgó vízréteget és a kihajtott klórbenzolokat katalitikusan oxidálja,
- nappal - napkollektorként működve - melegíti a kezelendő vízréteget, ami jelentősen növeli a sztrippelés határfokát.

A BME Vegyipari Műveletek Tanszékével együttműködve folytatták a szakaszos hibrid elválasztási módszerek fejlesztésére irányuló kutatásaikat.

A napenergia termikus hasznosítására irányuló kutató-fejlesztő munka során megterveztek és Cagliariiban installáltak egy, a tengervíz desztillációjára szolgáló, új típusú, üzemi méretű napenergiás berendezést. A rendszer bevizsgálását és optimalizálását a Cagliari Egyetemmel közösen végzik.

Energetikai ültetvényekről származó faféleségek termikus viselkedését tanulmányozták, különös tekintettel a hőbomlást befolyásoló paraméterekre, így a szerves sók, az extrahálható anyagok és a kéreg mennyiségére. Megállapították, hogy az extraktumok bomlása széles hőmérséklettartományban játszódik le, és ez befolyásolja a fa hőbomlását is. Az extrahálható anyagokat különböző származékképzési eljárások segítségével azonosították.

Ma már léteznek olyan gazdaságos és környezetkímélő faszéngyártási eljárások, amelyeknél a biomassza energiatartalmának többsége a faszénbe kerül. Ezen eljárások fejlesztésébe bekap-

csolódva módszert dolgoztak ki faszenek égési tulajdonságainak termogravimetriával történő tanulmányozására és az eredmények matematikai-reakciókinetikai leírására. A biomassza hatékony energetikai hasznosítását elősegítő kutatások az éghajlati katasztrófák elkerüléséhez járulnak hozzá, a Kiotói egyezménynek és az EU direktíváknak megfelelően.

Új, környezetbarát hordozóanyagot fejlesztettek ki helikopterrel végzett biológiai szúnyogírtáshoz. A granulátum formájú hordozóanyag alkalmas a szúnyoglárvák elpusztítására, mivel a rávitt hatóanyagot folyamatosan, szabályozott módon bocsátja ki. E tulajdonsága egyedülálló a világon. A gipszet, perlitet, karboxi-metil-cellulózt és glicerint tartalmazó granulátum tulajdonságainak optimalizálására vizsgálták a különböző körülmények között előállított termékek úszóképességet, úszási idejét, mechanikai szilárdságát és a hatóanyag leadási sebességét. Kifejlesztették a granulátum előállítási technológiáját.

Bízató eredményeket értek el propilén-glikol hűtőközegben alkalmazható, korróziógátló adalékanyagok kifejlesztésében. Az eredmények alapján reális lehetőség van a környezeti szempontból káros etilén-glikolt kiváltó, alacsony dermedéspontú, környezetbarát hűtőközeg létrehozására. Az új, propilén-glikol alapú hűtőközeg, a gépjárművek hűtőrendszere mellett ipari rendszerekben is felhasználható. Az adalékanyag szabadalmaztatására és az eljárás ipari megvalósítására 2005-ben kerülhet sor.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az AKI kutatói a hazai kutatóhelyek közül számos akadémiai kutatóintézetrel (KK-KI, KK-IKI, MFA, GKI) és egyetemi (ELTE, BME, DE, ME, SE, SZE, SZIE, VE) tanszékkel dolgoztak együtt különféle kutatási témákban. Az intézet BME-vel közösen működteti a hazai felületmérnök-képzés bázislaboratóriumát, és a Veszprémi Egyetem kihelyezett tanszékeként is részt vesz a hazai felsőfokú oktatásban. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály gyakorlatilag egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Műanyag- és Gumiipari Tanszékével. Az intézet munkatársai ezen kívül a több egyetemen (CEU, DE, Dunaújvárosi Főiskola, ELTE, ME, SE, SZTE, VE) tartanak graduális és posztgraduális kurzusokat.

Témáik többségét nemzetközi kutatási együttműködés keretében művelik. A közös kutatások kereteit egyrészt EU projektek, másrészt a következő kétoldalú együttműködések adják.

Plazmakémiai folyamatok modellezésében az OTA Szervetlen Kémiai Intézetével, fullerének termikus plazmában végzett szintézisével kapcsolatban a belgrádi Vinca Atommag Kutatóközponttal, az elektrokémiai kettősréteg vizsgálatában az Ulmi Egyetemmel, napenergiás desztillálók fejlesztésében a Cagliari Egyetemmel működnek együtt.

Polimer-kémiai kutatásokban igen eredményesen működnek együtt a Drezdai Polimer Intézetrel, a mainzi Polimer Kutatási Max Planck Intézetrel, a Nottinghami Egyetemmel és a Freiburgi Egyetemmel. 2004-től TÉT támogatással közös kutatási projektet indítottak a Bécsi Egyetemmel. Polimertechnológiai témákban hazai vállalatokkal (TVK Rt), a Bay Zoltán Anyagtudományi Intézetrel, a francia Clariant Huningue céggel, a penangi Malajzia Egyetemmel és a Twenti Egyetemmel végeznek közös kutatásokat.

TÉT támogatással két indiai kutatóhellyel van közös kutatási projektjük. A Jodhpur Egyetemmel együttműködve permanganát-komplexek szintézisét tanulmányozzák, a hyderabadi Indiai Technológiai Intézetrel fémtartalmú, mágneses aktív szenek előállítási lehetőségeit kutatják.

Műanyag hulladékok újrahasznosítási lehetőségeinek kutatásában az Okayama Egyetemmel (Japán), míg a biomassza anyagok energetikai felhasználásának kutatásában a Hawaii Egyetemmel, a Norvég Műszaki Egyetemmel, a nápolyi Frederico II. Tudományegyetemmel és a Katalán Műszaki Egyetemmel működnek együtt.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet kutatói által 2004-ben művelt OTKA pályázatok közül a következőkben értek el figyelemreméltó eredményeket:

- Szén alapú nanokompozitok előállítására és komplex szerkezeti jellemzésére irányuló pályázatukban (T043359) szilícium-tartalmú DLC-rétegeket növesztettek CVD módszerrel, és vizsgálták felületkémi és nanomechanikai tulajdonságaikat XPS, nano-indentációs és nano-karcolásos módszerekkel.
- Nanoporok plazmaszintézisére irányuló projektjükben (T047360) fullerének, továbbá nanoméretű cink-oxid és cink-ferrit szemcsék plazmatechnológiával történő előállításának részfolyamatait tanulmányozták és értelmezték.
- Nanoszerkezetű amfifil kotérhálók és gélek kutatásában (T046759) jelentős előrehaladást értek el az amfifil kotérhálók morfológiájának, nevezetesen a nanofázisok elválásának felderítésében.
- Az elektrokémiai adszorpcióval kapcsolatos kutatásaik (T031703, T045888, T037241, T042452) hozzájárultak a korróziós folyamatok első elemi lépésének pontosabb megismeréséhez, ami jó alapot ad az eddigieknél hatékonyabb korrózióvédelmi eljárások és technológiák kidolgozásához.
- A réz-alumínium fém-pár korróziós sajátságainak felderítése, és az azokat befolyásoló tényezők megismerése (T037693) lehetővé teszi a fűtési rendszerekben fellépő korróziós károsodások csökkentését.
- Az égésgátló szereket tartalmazó műanyagok hőbomlásának kutatása (T047377) fontos alapinformációkat szolgáltatott arra, hogy az adott hulladékfeleség újrahasznosítása miként valósítható meg környezetre ártalmas melléktermékek képződése nélkül.

Az intézet a következő egyéb hazai kutatási pályázatok művelésében vett részt 2004-ben:

- Hosszú élettartamú humán-izületi protézisek kifejlesztése (NKFP 1/013/2001): izületi endoprotézisekben alkalmazott, ultra-nagy molekulatömegű polietilént kezelték különféle ion- és atomsugarakkal a kopásállóság javítása céljából. Összefüggést találtak a kopásállóság növekedése és a felület kémiai állapotának megváltozása között.
- Az AKI Környezetvédelmi Laboratóriumának akkreditálása (OM-KMA 00221/2004): az akkreditálás után a Laboratórium az eddiginél is hatékonyabban fogja támogatni az intézetben folyó kutatásokat és képes lesz konkrét környezetvédelmi feladatok ellátására is. A kialakítandó vizsgálati háttér lehetőséget ad ivóvíz, felszíni és felszín alatti vizek, ipari víz, szennyvizek, szennyvíziszapok, talaj, valamint veszélyes hulladékok komplex fizikai-kémiai minősítésére, az érvényben lévő szabványok és törvényi előírások figyelembevételével.
- Új hordozóanyag helikopterrel végzett biológiai szúnyogirtáshoz (KMFP-00036/ 2002): a kutatási-fejlesztési munka során olyan olcsó, környezetbarát, könnyen gyártható, tárolható

és szállítható, hordozóanyagon rögzített készítményt dolgoztak ki, amely alkalmas szúnyoglárvák biológiai irtására. Kifejlesztették és elkészítették a készítmény célba juttatására alkalmas berendezést is. A fejlesztés fontosságát az adja, hogy Magyarországon is terjedőben van néhány gyötrő-szúnyogfaj és nyugat-nílusi láz vírushordozó szúnyogfaj, amelyek sokszor halálos szövődeményekkel járó megbetegedéseket terjesztenek. A pályázat kapcsán megvalósult kutatások, a technológiai fejlesztések és a beruházások lehetővé teszik e szúnyoglárvák elleni hatékony védekezést.

- Klórbenzolokkal szennyezett talaj és talajvíz tisztítása (KMFP-000318/2004): a Garé és Hidas térségében található, poliklór-benzolokkal szennyezett talajvíz előtisztítására egy 2 m³/h névleges kapacitású, modern adatgyűjtő és folyamatszabályozó rendszerrel ellátott, kísérleti üzemet terveztek és építettek meg. Megkezdték az üzem műszaki-gazdasági optimalizálását.
- Veszélyes hulladékok plazmatechnológiás ártalmatlanításának hazai megalapozása (KMFP-000547/2004): tisztázták több veszélyes hulladék termikus plazmában történő átalakításának célszerű körülményeit. Az eredmények megfelelő kiindulási alapot jelentenek a plazmatechnológián alapuló hulladékhasznosító eljárások hazai bevezetéséhez. Ennek érdekében együttműködnek két, az eredmények ipari megvalósításában érdekelt hazai céggel.

Az intézet kutatói a következő EU pályázatok kidolgozásában vettek részt 2004-ben:

- Új, felületmódosított protézisek (G5ST-CT-2002-50247): száraz levegőben végzett plazma-immersziós ionimplantációval jelentősen megjavították titán- és alumínium-tartalmú titánötvözetek keménységét és kopásállóságát. Nemzetközi együttműködésben megkezdődtek a kapott eredmények gyakorlati alkalmazásával kapcsolatos vizsgálatok is.
- Halogéntartalmú anyagok integrált termikus és kémiai kezelése (GRD1-CT-2002-03014): módszert dolgoztak ki a műanyag hulladékok pirolízisekor kapott olajok finomítására használt katalizátorok gyors és egyszerű tesztelésére. A módszerrel nyomon követték, hogy a projektben, a Karlsruhei Kutatóközpontban üzemelő kísérleti reaktorban, elektromos és elektronikai hulladékok hőbontása során kinyert olaj halogén-mentesítésére szolgáló zeolit katalizátorok aktivitása felhasználás közben miként változik. Módszert javasoltak a katalizátorok regenerálására. A teljes eljárás gazdaságosságát az EU projektben hamarosan üzembe helyezendő, ipari reaktor hosszabb idejű, folyamatos működése alapján lehet majd megítélni.
- Újszerű ívplazmás eljárás veszélyes hulladékok lebontására (GRD1-CT-2000-25035): széleskörű nemzetközi együttműködésben technológiát dolgoztak ki fémtartalmú szilárd ipari és energetikai hulladékok, valamint veszélyes szerves anyagok termikus plazmában végrehajtott együttes hőbontására és értékes építőipari anyagokká történő átalakítására. Elkészítették a technológia részletes műszaki-gazdasági értékelését és összeállították az ipari bevezetést célzó megvalósíthatósági tanulmányt.

Egyéb nemzetközi pályázatok:

- A Cagliari Egyetemmel folytatott, magyar-olasz TÉT együttműködés keretében az intézet kutatói megterveztek, legyártattak, és Olaszországban üzembe helyeztek egy tengervíz sótalanítására szolgáló, napenergiás modult. Megkezdték a rendszer üzemi körülmények közötti bevizsgálását és optimalizálását.

- Osztrák-Magyar TÉT pályázatot nyertek el két éves időszakra, szupramolekuláris polimerek kutatásában való együttműködéshez. A tárgyévben kapott eredmények lehetőségét biztosítanak új szerkezetű, telekelikus polimereken alapuló, szupramolekuláris rendeződésre képes polimerek előállítására.
- A DuPont amerikai céghez benyújtott kutatási pályázatukkal „DuPont Research Award” címen nyertek támogatást új típusú, funkciós, hiperelágazásos polimerekkel kapcsolatos kutatásaikhoz.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Erdődi G, Iván B: Novel amphiphilic conetworks composed of telechelic poly(ethylene oxide) and three-arm star polyisobutylene, *Chemistry of Materials*, 16, 959-962 (2004)
2. Fekete E, Moczó J, Pukánszky B: Determination of the surface characteristics of particulate fillers by linear IGC; a critical approach, *Journal of Colloid and Interface Science*, 269, 143-152 (2004)
3. Forgács E, Cserhádi T, Miksik I, Echardt A, Deyl Z: Simultaneous effect of organic modifier and physicochemical parameters of barbiturates on their retention on a narrow-bore PGC Column, *Journal of Chromatography B*, 800, 259-262 (2004)
4. Horányi Gy: Investigation of the specific adsorption of HSO_4^- (SO_4^{2-}) and Cl^- ions on Co and Fe by radiotracer technique in the course of corrosion of the metals in perchlorate media, *Corrosion Science*, 46, 1741-1790 (2004)
5. Ladó C, Then M, Varga I, Szőke É, Szentmihályi K: Antioxidant property of volatile oils determined by the ferric reducing ability, *Zeitschrift für Naturforschung*, 59c, 354-358 (2004)
6. Mészáros E, Várhegyi G, Jakab E, Marosvölgyi B: Thermogravimetric and reaction kinetic analysis of biomass samples from an energy plantation, *Energy and Fuels*, 18, 497-507 (2004)
7. Mészáros G, Szenes I, Lengyel B: Measurement of charge transfer noise, *Electrochemistry Communications*, 6, 1185-1191 (2004)
8. Szabó P, Epacher E, Földes E, Pukánszky B: Miscibility, structure and properties of PP/PIB blends, *Materials Science and Engineering, A* 383, 307-315 (2004)
9. Szép-völgyi J, Mohai I, Gubicza J, Sáray I: RF thermal plasma synthesis of ferrite nanopowders from metallurgical wastes, *Key Engineering Materials*, 264-268, 2359-2362 (2004)
10. Tóth A, Mohai M, Ujvári T, Bell T, Dong H, Bertóti I: Surface chemical and nanomechanical aspects of air PIII-treated Ti and Ti-alloy, *Surface and Coatings Technology*, 186, 248-254 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Átlaglétszám ¹ :	73	Ebből kutató ² :	47
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			20
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			102
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			102
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	68	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	-
nemzetközi együttműködés keretében:	27	SCI által regisztrált folyóiratban:	65
összesített impakt faktor:	66,129	összes hivatkozás száma ⁴ :	936
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			774
Megjelent könyv:	1	könyvfejezet:	18
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	4	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	38	poszterek száma ⁶ :	46
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			20
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		361,673 MFt	
Beruházási támogatás:	- MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	1
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			17
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	19,236 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			12
NKFP:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	26,788 MFt
Egyéb:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	66,170 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			4
EU forrásból:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	35,342 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,163 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			28,799 MFt

Kémiai Kutatóközpont
BIOMOLEKULÁRIS KÉMIAI INTÉZET
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67. 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 325-9040, Fax: 325-5990
e-mail: palg@chemres.hu, honlap: http://www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Biomolekuláris Kémiai Intézet fő feladata volt 2004. évben:

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása az élő szervezetek kémiai folyamatainak, az ezekben szerepet játszó molekuláknak a megismerése, a folyamatok kedvező irányú befolyásolása, illetve a molekulák tervezése és szintézise területén.

Az intézet további feladatai voltak a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, valamint szakmai tanácsadás és gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Palládium-katalizált, keresztkapcsolásos technika kiterjesztésével piridazingyűrűvel kondenzált új heteroaromás rendszereket szintetizáltak és nemzetközi kooperációban vizsgálták az új származékok biológiai (interkaláló) hatását.

Új fenotiazin-származékokat ismertek fel és szintetizáltak, melyek a multidrogon-rezisztencia gátlása terén aktívnak bizonyultak. Minthogy a tumoros betegségek kezelésének egyik legnagyobb akadálya az, hogy a hatékony tumorgátló szereket a szervezet önként (ún. „efflux pumpa” mechanizmussal) eltávolítja, ezek az anyagok, melyek éppen ezt az eltávolítást gátolják, fontosak lehetnek a gyógyításban.

Ikerionos reaktív heterociklusok átrendeződését figyelték meg és több esetben sikerrel értelmezték e bonyolult folyamatok reakciómechanizmusát. Az elért kutatási eredmények lényeges hozzájárulást nyújtanak újabb ciklizációs reakciók kidolgozásához és általánosításához.

Olyan kinkona alapú bifunkcionális organokatalizátorokat (fématomot nem tartalmazó szerves katalizátorokat) állítottak elő, amelyek aszimmetrikus Michael-addíciós reakciók megvalósítására alkalmasak. Így számos, gyógyászatban alkalmazott királis hatóanyag szintézise válik lehetővé. Az új módszer előnye, hogy nem alkalmaz nehézfém katalizátorokat, ezáltal a végtermék tisztítása egyszerűbbé válik, s a környezet nehézfém terhelése is megszűnik.

Kutatói kapacitás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Teljes ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 18 M Ft.

Az irodalomból ismert diketon intramolekuláris aldolkondenzációját vizsgálták és megoldották a D-gyűrű kialakítását. Az említettek alapján és az előző évben sikeresen megvalósított lizergsav-szintézis további optimalizálásával olyan eljárást dolgoztak ki, amely nagyipari gyártás alapját képezheti. Az eljárást szabadalmaztatták. A módszer alapján nemcsak a (+)-lizergsav,

hanem a gyógyászatilag értékes α -ergokriptin és bromo-kriptin totálszintézise is kivitelezhetővé vált.

A 8-oxo-ergolén sikeres szintézise alapján egy eddig még nem szintetizált alkaloid, a cikloklavin előállításának fontos lépéseit sikerült megvalósítaniuk.

Korábbi tapasztalatok alapján új spiro-oxindolváz vegyületeket állítottak elő együttműködés keretében tumor- és gyulladásgátló hatás vizsgálata céljából.

Enantioszelektív szintézisutat dolgoztak ki 4-acetoxi-pipekolin észter antipódok előállítására. Két tükörképi mintát átadtak GABA-receptor kötődési, illetve transzportvizsgálatok céljából.

Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban 5 fő. Teljes ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,6 M Ft.

Ionotróp glicinreceptorok tropeinszerkezetű modulátorait állították elő, amelyek nanomólos affinitása nagyságrendekkel meghaladja az eddigi allosztérikus modulátorokét. Ezzel lehetővé válik új típusú, receptor- és alegység-specifikus terápiás ágensek kifejlesztése.

Modellt állítottak fel, melynek segítségével az 5-HT₃ receptorok agonista kötőhelye azonosítható és a kötődés hatására bekövetkező konformációváltozás értelmezhető.

AGP-szérumfehérje két genetikai variánsának CD-spektroszkópiás vizsgálatával kimutatták, hogy diazepamnak és 3-alkil számazékainak kötődésekor az F1/S variáns a (P) ligandkonformációt preferálja, míg észter-származékok esetében az A-variáns mutat ilyen értelmű sztereoselektivitást.

Dikumarol kötődése az F1/S variáns CD-spektrumot indukál, ami az intramolekuláris H-kötések következtében kialakuló királis konformerek szelektív kötődésének eredménye.

Kutatói kapacitás: 12 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Teljes ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 10 M Ft.

Új szintézisstratégiát alkalmazva egy eddig ismeretlen homokirális, karbociklusos nukleozidot állítottak elő, amelynek – mint potenciális tumorgátló szernek – biológiai hatásvizsgálata jelenleg folyamatban van.

A korábban szintetizált 5'-antiszensz oligonukleotid-(5-fluor-2'-dezoziuridin)_n-3' PS-PO kimérák *in vitro* tumornövekedés-gátló hatásának vizsgálata során kiderült, hogy az említett konjugátumok relatív hatékonysága (az 1 FdU egységre számított IC₅₀ érték) több mint egy nagyságrenddel nagyobb, mint a referencia FdU-é. Az ilyen típusú oligonukleotid prodrugok, amelyekből a gyógyszermolekula (jelen esetben az FdUMP) *in vivo* enzimatisz hidrolízis útján szabadul fel, a tumorgátló szerek egy új családját képviselik.

Öt új peptid nukleinsav (PNS) monomert szintetizáltak, amelyek PNS oligomerekbe történő beépítésével várhatólag növelhető a PNS-DNS, illetve PNS-RNS duplexek stabilitása, valamint a PNS szál bázishiba felismerő képessége. Mindennek a nukleinsav alapú diagnosztikumok (PNS mikrochipek) továbbfejlesztésében van gyakorlati jelentősége.

Kutatói kapacitás: 3,3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 23 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,15 M Ft.

A potenciális antiepileptikum, Q5 ionotróp (AMPA) és metabotróp Glu-receptorok funkcióira gyakorolt hatását vizsgálták hippokampusz szelvényben kontrol és epileptikus körülmények között elektrofiziológiai mérési technikák alkalmazásával.

GABA_A receptor alloszterikus benzodiazepin kötőhelyén ható triazin-származékokat terveztek és tesztelték a szintetizált vegyületeket.

Reaktív oxigénradikálok képződését vizsgálták epilepsziás körülmények között izolált mitokondriumokban fluoreszcencia-detektáláson alapuló gyorskinetikai technika alkalmazásával, valamint hippokampális szelettenyészetben konfokális lézer-szkenning mikroszkópiával.

Jellemezték egyes központi idegrendszeri szomatosztatin-receptor altípusok és a szomatosztatin analóg, TT-232 kölcsönhatását: receptorkötődési és funkcionális vizsgálatokat végeztek *in vitro* és *in silico*.

Egy függőséget kialakító drog, a GHB hatását vizsgálták a nucleus accumbensben kötődési és funkcionális mérésekkel, elektrofiziológiai és radioaktív nyomjelzési technikák alkalmazásával.

Kutatói kapacitás: 11 fő, ebből intézeti állományban: 11 fő. Teljes ráfordítás: 88 M Ft, ebből pályázati forrás: 52 M Ft.

Összehasonlító vizsgálatokat végeztek patkány máj S9 frakció és májsejtek benz[a]pirén és 2-aminoantracén metabolikus aktiválására nézve. Megállapították, hogy a májsejtek alkalmazása igen hasznos modell lehet a testidegen vegyületek mutagén hatásának becslésében.

Részletesen vizsgálták a p-nitrofenol-hidroxiláz reakció gátolhatóságát és megállapították, hogy ezen reakciót a CYP2A6, a CYP2C19 és a CYP2E1 enzimek katalizálják. Megállapították továbbá, hogy a dexametazon humán májsejtekben gátolja a CYP1A enzim 3-metil-kolantrénnel való indukcióját, valamint hogy a gátlás a mRNS átíródásának a gátlására vagy a mRNS fokozott bomlására vezethető vissza.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Teljes ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 3,51 M Ft.

Megállapították, hogy cukorbetegséget modellező kísérleti állatokban a betegség korai szakaszában jelentkező szívnagyobbodás mechanizmusa milyen mértékben függ a nitrogén-monoxid és a peroxinitrit keletkezésétől, illetve a karbonilezési reakcióktól.

Tumorelleses fotoszenzibilizátorok felhalmozódásának egy saját összeállítású fluoreszcenciás berendezéssel történő *in vivo* mérési módszerét dolgozták ki.

A sejttapadást elősegítő, EGF receptorfüggő jelátviteli rendszerben szerepet játszó egyes fehérjék és szintetikus vegyületek aktivitását mérték ki tumoros és idegrendszeri eredetű sejtvonalakban.

Elsőként a világon olyan kemometriai módszereket dolgoztak ki, amelyekkel lehetővé vált kén-, nitrogén- és oxigénatomot tartalmazó heterociklusos vegyületek retenciós indexeinek előrejelzése.

Sikerült a korábban változókiválasztásra szolgáló páronkénti korrelációs módszerüket továbbfejlesztelniük, osztályozásra alkalmassá tenniük és összehasonlítaniuk a Prokrusztész-forgatásos eljárással.

Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Teljes ráfordítás: 56 M Ft, ebből pályázati forrás: 19,4 M Ft.

A heparin és a heparán-szulfát oligoszacharid egységeinek előállítására kidolgozott szintézisstratégiájukat kiterjesztették magasabb tagszámú oligoszacharidok szintézisére. Így ortogonálisan védett tri- és tetra-szacharidokat szintetizáltak. A védett oligoszacharidokból a heparin

és a heparin-szulfát alkotórészét képező szulfatált célvegyületeket állítottak elő biológiai vizsgálatok céljára. A kidolgozott szintézisstratégiát nemzetközi kooperációban kiterjesztették azacukor-tartalmú glikozidáz-inhibitorok előállítására is. Az együttműködés keretében szintetizálták a heparánáz enzim inhibitorait.

Új reagenst vezettek be szénhidrátok ciklikus benzilidén acetáljainak benzil-éterekké történő átalakítására. A kidolgozott reakció jobb hozamú és szélesebb körben alkalmazható, mint az eddig ismert módszerek.

Új, igen reaktív alkilszulfenilező reagenst fejlesztettek ki. A reagens alkalmazásával új, rendkívül hatékony glikozilezési módszert vezettek be.

Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Teljes ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 10 M Ft.

A tumor kemoterápiában alkalmazható glutation peptidomimetikumokat állítottak elő, szintézisükre új módszert dolgoztak ki. Új izotiocianát rovarattraktánsokat azonosítottak és szintetizáltak.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 18 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,5 M Ft.

Jelzéstéchnikai eljárásokat dolgoztak ki több, gyógyszerre fejlesztendő vegyület ¹⁴C- és/vagy ³H-izotópokkal jelzett változatainak előállítására.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Teljes ráfordítás: 16 M Ft, ebből pályázati forrás: 3 M Ft.

Beszámoló egy kiemelt kutatási eredményről:

Mitokondriális károsodás in vitro epilepsziamodelben

A felnőttkori epilepszia egyik leggyakoribb formája, a halántéklebény epilepszia, az esetek egy részében nem kezelhető gyógyszeres úton. Ennek az ún. gyógyszer-rezisztenciának a hátterében rejlő, sejtszintű folyamatokat eddig még nem sikerült azonosítani. A korábbi évek kutatása az epilepsziával járó receptorszintű és anatómiai elváltozások vizsgálatára irányult. Ugyanakkor a gyógyszer-rezisztens epileptikus szövetek tanulmányozása az idegsejtek anyagcseréjének hosszú távú változásaira terelte a figyelmet.

Epileptikus aktivitás alatt az idegsejtek ion- és energiaháztartásának fenntartása fokozott terhet ró az energiahordozó molekulák (ATP) szintéziséért felelős sejtszervecskékre, a mitokondriumokra. Habár többféle olyan mechanizmus létezik, amely a mitokondriális ATP-szintézist a sejt igényeihez igazítja, jelenleg nem ismeretes, hogy ezek hogyan működnek patológiás körülmények között és fokozott aktiválódásuk milyen maradandó hatással van a mitokondriumokra. Mivel három olyan mitokondriális kulcsenzim is van, amelynek működését a kalciumion-szint növelése serkenti, a mitokondriális kalciumion-koncentráció vizsgálata az ATP-szintézis változásaira enged következtetni. Ugyanakkor a túlzott kalciumion-felvétel a mitokondriumok károsodását és így az energiaháztartás deficitjét okozhatja.

Az intézet Neurokémiai Osztályának kutatói az idegszelet tenyészeteken hipomagnéziás körülményekkel kiváltott epileptikus aktivitást választották a gyógyszer-rezisztens epilepszia modelljéül és az epileptikus aktivitás következtében kialakuló metabolikus változásokat elektrofiziológiai és mikrofluorimetriás módszerekkel követték nyomon. Kezdeti kísérleteikben kimutatták, hogy a mitokondriális membránpotenciál és a mitokondriális kalciumion-

koncentráció megváltozik epileptikus rohamok alatt, és ezen változásoknak a szabad gyökök képződésének fokozása révén szerepük van az epileptikus állapotot követő idegsejtpusztulásban. Az intézet új beruházásának, egy 'state-of-art' kombinált elektrofiziológiás és pásztázó-lézer konfokális mikroszkópos mérőállomásnak a segítségével a vizsgálatokat kiterjesztették egyedi idegsejtek, sőt egyedi mitokondriumok szintjére is. Így elsőként sikerült megmutatniuk, hogy az epileptikus aktivitás egy-egy specifikus formája miként befolyásolja a mitokondriumok működését. A rohamok közötti ún. interiktális epileptikus aktivitás alatt a mitokondriális kalciumion-koncentráció és membránpotenciál fluktuálni kezdett az idegnyúlványok egyes régióiban. Az epileptikus rohamok alatt ez a fluktuáció kiterjedt az egész idegsejtre és a mitokondriumok egyszerre depolarizálódtak. A mitokondriumok kalciumion-felvételét és -leadását specifikusan blokkoló szerekekkel megállapították, hogy a mitokondriumok kalciumion-fluktuációja és a membránpotenciál változása között ok-okozati összefüggés van. Ugyanakkor a mitokondriális permeabilitási csatorna aktiválódásának nem volt szerepe a mitokondriumok depolarizálásában, ami ellentétben áll a túlzott idegi serkentéssel kiváltott sejtkárosodásnál (excitotoxicitás) tapasztaltakkal. Mivel a mitokondriális membránpotenciál az ATP-szintézis fő hajtóereje, az epileptikus rohamok okozta depolarizáció károsan befolyásolja az idegsejtek energiaháztartását és hozzájárulhat a patológias állapot súlyosbodásához.

Az epileptikus aktivitás közvetlenül, illetve a szuperoxid gyökanion termelés fokozásán keresztül kifejtett hatása tartósan megváltoztathatja a mitokondriumok működését, és érzékenyebbé teheti az idegsejteket a visszatérő rohamokkal szemben. Ezen hosszú távú változások tanulmányozása egy berlini kutatóintézettel (Humboldt Egyetem) együttműködésben zajlott. Krónikusan epileptikus humán és állati szövetmintákból a mitokondriális károsodás jeleit sikerült kimutatni. Fiziológiás ingerlés hatására az egészséges idegszövet metabolikus aktivitása fokozódik, amelyet az ATP-szintéziséhez elengedhetetlen molekula, a NADH szintjének növekedése jelez. A krónikusan epileptikus idegszövetben a metabolizmus aktiválódása nem következett be és ez a hiányosság az epileptikus aktivitás által legjobban érintett anatómiai struktúrákban volt a legkifejezettebb. Ugyanakkor pásztázó-lézer konfokális mikroszkópiával ki lehetett mutatni, hogy a mitokondriumok rendelkeznek a kalciumion és a szubsztrát transzportjához szükséges membránpotenciállal. Ebből arra lehet következtetni, hogy a NADH-szintézis hibás szabályozásának hátterében a kalciumion-függő mitokondriális dehidrogenáz enzimek károsodása áll.

Mind a krónikus, mind az akut epilepsziamodellekből származó eredményeknek, az epileptikus aktivitás metabolikus következményeinek leírásán túl, jelentősége van potenciális neuroprotektív stratégiák kidolgozásában is. A gyógyszer-rezisztencia mechanizmusának megismerése pedig az antiepileptikus terápia számára jelenthet áttörést.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézet eredményesen működik együtt hazai egyetemi kutatóhelyekkel. Ezek közül kiemelendő a Semmelweis Egyetem Orvosi-Vegyertani Tanszékével folytatott hosszú távú kooperáció, aminek a keretében több közös publikáció jelent meg kondenzált pirimidin-származékok előállításáról és vizsgálatáról. A Szegedi Egyetem Mikrobiológiai Tanszékével multidrog-rezisztencia gátlására végeztek tesztek. A Pécsi Tudományegyetem Biokémiai és Orvosi Kémiai Intézetével folytatott közös kutatások négy publikációt eredményeztek. A SE

I. sz. Patológiai és Kísérleti Rákkutató Intézetében végzik az intézetben előállított oligonukleotid-prodrugok tumorgátló hatásának tesztelését. A Szegedi Egyetemen kemometriai kutatásokban működnek együtt.

Az intézet tevékenyen részt vesz az egyetemi oktatómunkában. Összesen 11 kutató oktat rendszeresen a BME-n, a SE-en és az ELTE-n. Két közös laboratóriumot működtetnek az ELTE-vel. Az intézetben 14 PhD hallgató dolgozik.

2005-ben egyetemi kollégákkal közösen 13 tudományos publikációjuk jelent meg.

A hazai együttműködések kiemelt jelentőségű hányada a MEDICHEM I., illetve II. program – „Validált célmolekulákon alapuló gyógyszer- és diagnosztikum tervezés” – keretében folyt, illetve folyik jelenleg is. E programban négy hazai egyetemen (Pécsi Tudományegyetem, Semmelweis Egyetem, ELTE, BME) dolgoznak együtt.

Az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoportjával a szomatosztatin receptorokon való kötődést vizsgálják. Az MTA Enzimológiai Intézetével együtt vesznek részt 2005-2007 között, egy tematikus GVOP-pályázat kutatásaiban oligonukleotid – prodrug kutatások témával. Az MTA Növényvédelmi Kutatóintézetével új fermonok szintetizálását végzik együttműködésben.

Több hazai vállalat (pl. Ubichem Rt., Richter Gedeon Vegyészeti Gyár, IVAX Gyógyszerkutató Intézet) részére végeznek jelentős, gyakorlati célú K+F munkát.

Élénk és eredményes nemzetközi együttműködések folytak 2004-ben.

A 2003-ban elnyert Európai Kiválósági Központ pályázat programja lehetőséget nyújtott számos tanulmányútra, illetve külföldi kutatók fogadására.

2004-ben sikeresen megszervezték a XXI. European Conference on Heterocyclic Compounds (Sopron) rendezvényét.

6 tudományos publikációjuk jelent meg külföldi kutatókkal kooperálva 2004-ben.

A Humboldt Egyetemen (Berlin) „Ca és NO hatása a metabolizmus aktivitására és az idegsejtek sérülésére epilepsziában” tématerületen kialakított gyümölcsöző együttműködésük eredményeit 2004-ben közös dolgozatban foglalták össze.

Német-magyar TÉT-projekt részeként a frankfurti Max-Planck-Institute für Hirnforschungban folytatott kéthónapos tanulmányút keretében az intézet egyik PhD hallgatója mutagenézissel glicin-receptor pontmutánsokat állított elő, amelyeket az intézetben vizsgáltak tovább.

Az Alaszkai Egyetemen folytatott közös munka eredményeként született a „The structural basis of ligand interactions in the 5-HT₃ receptor binding site” c. könyvfejezet.

Az intézetben szintetizált, potenciálisan tumorgátló hatású karbociklusos nukleozidok biológiai tesztelését egy német kutatócsoport végzi (Resprotect Ltd., Drezda) tudományos együttműködés keretében.

Az Osztrák-Magyar Akcióalapítvány támogatásával, a Grazi Műszaki Egyetem Szerves Kémia Tanszékével közösen azacukor típusú glikozidáz-inhibitorokat, elsősorban a heparánáz enzim bnb gátlószereit szintetizálták. Az együttműködésben két PhD hallgató két-két hónapig a grazi egyetemen tanulmányozta az azacukrokra ott kidolgozott metodikának heparin oligoszacharidokra történő alkalmazását. A további rövidebb kutatócserék az intézet kutatói által korábban kidolgozott ortogonális védőcsoportstratégia azacukrokra való sikeres kiterjesztését eredményezték. A kutatásokról közösen számoltak be a 22. Nemzetközi Szénhidrát Szimpóziumon.

Fontos gyakorlati célú együttműködések folytatnak több külföldi vállalat kutatóival, így például a következőkkel: Altana Pharma AG (Németország), Bayer CropScience (Németország), Sigma-Aldrich (Németország), Clariant-Lancaster (UK), Hawai-Biotech (US), Novartis (Svájc).

2004-ben összesen 38 külföldi konferenciái, illetve tanulmányúti kiutazáson vettek részt az intézet kutatói.

Több nemzetközi folyóirat szerkesztőbizottságában is képviselteti magát az intézet (Drug Metabolism Reviews, European Journal of Drug Metabolism and Pharmacokinetics, Pest Management Science, Heterocyclic Communication, Arkivoc).

Több fontos nemzetközi szervezet munkájában vesznek részt tisztségviselőként: European Collegium on Heterocyclic Chemistry, Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry tudományos bizottsága, International Society for the Study of Xenobiotics, COST B16, D13, D31 bizottságok.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet biomolekuláris és szerves kémiai kutatási iránya, a korszerű tudományos irányzatokhoz illeszkedve, az élettudományi kutatások integráns részeként tekinthető. Különösen igaz ez, ha a 2001-2003. közötti időre NKFP-támogatást elnyert MediChem I., illetve annak folytatásaként a MediChem II. projektek céljait és részfeladatait tekintjük. Az intézet által koordinált MediChem Konzorcium, Validált célmolekulákon alapuló gyógyszer és diagnosztikum tervezés c. projektje a Nemzeti Kutatási Fejlesztési Pályázaton 410 millió forint támogatást nyert el.

Az interdiszciplináris kutatási potenciált összefogó konzorcium kutatásainak elsődleges célja volt, hogy hozzájáruljon a Magyarországon legfőbb halálokként szereplő szív- és érrendszeri, valamint daganatos megbetegedések, továbbá bizonyos idegrendszeri megbetegedések korai felismerését célzó, nagy kapacitású diagnosztikai eljárások kidolgozásához, diagnosztikai reagensek kifejlesztéséhez, valamint a betegségek kezelésére irányuló specifikus gyógyszerek előállításához és terápiás kipróbálásához.

Az intézetnek meghatározó szerepe volt a programban, aminek egyik legfontosabb eredménye, hogy az új hatóanyagok kutatásának feladatait az anyagok előállításától, a szerkezetvizsgálatokon és a hatásmechanizmus felderítésén át a fiziológiai-klinikai hatásvizsgálatokig egységbe foglalta.

Az intézet által elért eredmények közül megemlítenők a következők:

Több új, biomolekulákon aktív heterociklusos vázú molekulát állítottak elő. Felderítették a vegyületek biológiai hatását. Kimutatták, hogy a GYKI-47261 jelzésű gyógyszerjelölt anti-epileptikum nem toxikus a májsejtekre *in vitro*. Új, proteoglikán-fehérje kölcsönhatásokon alapuló, kismolekulájú vegyületeket szintetizáltak. Szabad gyök fogó tulajdonsággal rendelkező komplexeket állítottak elő, amelyek engedélyezése folyamatban van. Olyan szintetikus, analitikai és hatásvizsgálati módszereket fejlesztettek ki, amelyek jól alkalmazhatók a racionális hatóanyag-tervezés során. A neurális hálózat elvén működő farmakofor modellt alakítottak ki. Részt vettek az EGIS-7229 antiarrithmikum kidolgozásában, ami szabadalmi oltalmat kapott. Proteomikai módszerekkel kimutatták az MMP9 és MMP2 szerepét fényindukált retinopatiában. *In silico* módszert dolgoztak ki az AMPA-típusú glutaminsav receptor ligandumok agonista, illetve antagonistá hatásának előrejelzésére. Olyan antiszensz oligonukleotid-származékot sikerült előállítaniuk, amely a már ismert AON-gyógyszernél mintegy 8-szorosan hatásosabbnak bizonyult.

A „Center of Excellence for Biomolecular Chemistry” program 2004-ben több területen kiemelkedő kutatási eredményeket hozott. Így pl. új, szintetikus módszereket fejlesztettek ki

és élettanilag aktív heterociklusos vegyületeket állítottak elő, a drug-receptor kölcsönhatások modellezésére számítógépes programot készítettek, aktív és inaktív CNS-receptor konformációk predikcióját írták le *in silico*, felderítették a szabad gyökök szerepét epilepsziamodellekben *in vivo*.

Különösen gyümölcsözőek voltak az együttműködések a következő kutatóhelyekkel: Danish University of Pharmacological Sciences, Catholic University of Louvain-la-Neuve, University Hospital, Malmö, European Institute of Oncology, Milano, FOM Institute for Atomic and Molecular Physics, Amsterdam, Technical University of Graz.

A program keretében több új kutatási együttműködés jött létre, illetve erősödött meg. Több fiatal kutató tett külföldi tanulmányutakat, amelyek révén új mérési módszereket sikerült meghonosítaniuk, illetve közös konferencia-előadásokat tartottak.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Nagy I, Hajós Gy, Riedl Zs: New preparative route to hetaryldienes and azadienes, *Heterocycles*, 63, 2287-2307 (2004)
2. Moldvai I, Temesvári-Major E, Incze M, Szentirmay É, Gács-Baitz E, Szántay Cs: Enantioefficient synthesis of α -ergocryptine: First direct synthesis of (+)-lysergic acid, *The Journal of Organic Chemistry*, 69, 5993-6000 (2004)
3. Kovács I, Simon Á, Szárics É, Barabás P, Héja L, Nyikos L et al. (7): Cyclothiazide binding to functionally active AMPA receptor reveals genuine allosteric interaction with agonist binding sites, *Neurochemistry International*, 44, 271-280 (2004)
4. Jemnitz K, Veres Zs, Török G, Tóth É, Vereczkey L: Comparative study in the Ames test of benzo[a]pyrene and 2-aminoanthracene metabolic activation using rat hepatic S9 and hepatocytes following *in vivo* or *in vitro* induction, *Mutagenesis*, 19, 245-250 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Átlaglétszám ¹ :	92	Ebből kutató ² :	65
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			34
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			36
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			36
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	27	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	-
nemzetközi együttműködés keretében:	6	SCI által regisztrált folyóiratban:	26
összesített impakt faktor:	42,972	összes hivatkozás száma ⁴ :	440
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			375
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	2
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	4	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	18	poszterek száma ⁶ :	27
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			12
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		368,190 MFt	
Beruházási támogatás:	- MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	1
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			12
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,125 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			15
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	107,200 MFt
Egyéb:	13	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	34,636 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	40,881 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			1
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,388 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			0,739 MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Megvizsgálták a Hawaii Biotech amerikai gyógyszerfejlesztő cég által előállított, intravénás bevitelre tervezett karotinoid származék kölcsönhatását humán szérum albuminnal (HSA). Megállapították hogy a HSA a molekulát megköti és megakadályozza annak aggregációját vizes közegben, így az biztonságosan alkalmazható injekciós készítmény hatóanyagaként nagy mennyiségű szabadgyök felszabadulásával járó akut emberi megbetegedések kezelésére. Kimutatták, hogy a széleskörű farmakológiai aktivitással rendelkező kurkumin megkötődik a DNS kis árkában. Ez az eredmény új megvilágításba helyezheti a molekula részleteiben korántsem tisztázott daganatellenes és egyéb hatásait.

Az Onkológiai Intézettel együttműködve klinikai vérmintákban meghatározták az AGP genetikai összetételét.

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Felületkémiai és Katalízis Intézet fő feladata 2004-ben a következő volt:

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a felületkémia és a heterogén-katalízis-kutatás területén, különös tekintettel a határfelületekre, az aszimmetrikus katalízisre, a nanodimenziójú részecskékre és szerkezetekre.

Az intézet további feladatai voltak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Új mangán- és vastartalmú, pirokatechin-oxidáz és fenoxazinon-szintetáz típusú, funkcionális enzimmodelleket állítottak elő dioximáto-ligandumok felhasználásával. Részletesen vizsgálták az új komplexek szerkezetét (egykristály röntgendiffrakció, illetve oldatröntgen, Mössbauer-spektroszkópia) és katalitikus aktivitását (gázvolumetria, ESR-spektroszkópia) 3,5-diterc-butyl-pirokatechin és 2-amino-fenol modell-szubsztrátum oxidációjában. Megállapították a modellreakciók kinetikáját és mechanizmusát. A vizsgált esetekben az oxidáció szabadgyökös mechanizmus szerint játszódik le, aminek fő lépése vagy a hidrogénatom-leszakítás, vagy pedig a proton-csatolt elektronátvitel az aromás OH-csoportról a dioxigén molekulára. Deutérium kinetikus izotópeffektus méréseivel e két eset megkülönböztethető és ezáltal *összefüggés mutatható ki az aktivitás és a katalizátorkomplex szerkezete között.*

Kutatói kapacitás: 3,5 fő, ebből intézeti állományban: 3,5 fő. Teljes ráfordítás: 17,5 M Ft, ebből pályázati forrás: 1 M Ft.

Eljárást dolgoztak ki új típusú, önszerveződésen alapuló felületmódosításra acél és vas felületén. Tanulmányozták alkil-mono- és difoszfónátok ($\text{H}(\text{CH}_2)_n\text{-PO}_3\text{H}_2$, ahol $n=6-10$, illetve $\text{H}_2\text{O}_3\text{P}-(\text{CH}_2)_n\text{-PO}_3\text{H}_2$, ahol $n=5-12$) önszerveződését, a felületi rétegek kialakulásának kinetikáját és korróziógátló hatását. A kidolgozott eljárást alkalmazva megvizsgálták, hogy ezek a speciális tulajdonsággal rendelkező rétegek hogyan építhetők össze poliakrilát vizes bázisú bevonati rendszerekkel. Megállapították, hogy a foszfónátos kezelés minden esetben nagy mértékben csökkentette mind a vizes bázisú lakk száradása során fellépő korróziós károsodást, mind pedig a fém/foszfónát-réteg/lakk hármas rendszer korrózióját agresszív közegben. Tanulmányozták a foszfónátok passzív vas felületen lejátszódó önszerveződését. Megállapították, hogy az oxidréteg igen fontos szerepet játszik a foszfónátcsoport felületi kölcsönhatásában. Potenciosztatikusan passzívált vas felület a foszfónát réteg jelentős stabilizálását eredményezte.

Önszerveződött molekuláris rétegek segítségével a tömbi fázistól eltérő tulajdonságú (acél, alumínium, horgany és tűzhorgany) korróziógátló és adhéziónövelő fémfelületeket hoztak létre, amely elősegíti fémfelületeken a védőbevonatok biztonságos kialakítását. Megállapították, hogy a felületeken kialakított szerves bázisú, önszerveződő rétegekkel érhető el a legjobb eredmények.

Langmuir-Blodgett és önszerveződött nanorétegek kialakításával nagymértékben csökkentették réz és vas korrózióját, valamint a korrózióért felelős mikroorganizmusok megtapadását.

Az adszorpciós-deszorpciós folyamatoknak a réz felületén történő *in situ* nyomon követésére az elektrokémiai kvarckristály – mikromérleg – módszert alkalmazták.

Megvalósították alumínium-oxid-hidroxid mikrorészecskék felületének titán-dioxiddal történő bevonását, és kidolgozták azokat a kísérleti paramétereket, amelyek lehetővé teszik a bevonat kristályszerkezete előre eltervezett minőségének elérését.

Új típusú, korrózióvédő bevonatrendszer előállítását dolgozták ki armco vas felületének védelmére, amely a korábban már sikerrel alkalmazott önszerveződő molekulák rétegének és szeretlen ZrO_2 -rétegeknek az együttes alkalmazásán alapul. Kimutatták, hogy a két, különböző típusú védőréteg kombinált alkalmazása rendkívül nagymértékű szinergikus effektust eredményez.

Megvalósították a nanoindentáció során keletkezett lenyomat alakjának összehasonlítását a próbatest alakjával és a módszert üveghordozós SnO_2 -réteg és a Ti-fém vizsgálatára, alkalmazták. A durvaszemcsés titánon szemcsénként eltérő anizotrópiát, míg az SnO_2 rétegen eltérő mértékű relaxációt mutattak ki. A katalizátorkutatás számára a vizsgálatok új eredményekhez vezethetnek.

Vizsgálták szén-nanocsövek vezetőképességét ab initio kvantumkémiai módszerek alkalmazásával. Kimutatták, hogy az „ $n - m = 0 \pmod{3}$ ” szabály nem szigorúan érvényes. Az eredmény a szén nanocsövek tervezésénél bírhat jelentőséggel. Numerikus módszereket dolgoztak ki, amelyek alkalmasak különböző alakú grafit-mintázatokban a Kekulé-határszerkezetek és a konjugált gyűrűk megszámlálására. A módszer a szén-nanocsövek stabilitásának meghatározása szempontjából jelentős.

A szén-nanocsövek felületét módosították, hogy azoknak a különböző műanyag kompozitokba való bekeverésekor tapasztalható összetapadását megelőzzék. A módosított szén-nanocsövek jelenléte javítja a műanyag különböző fizikai tulajdonságait. Az aromás és alifás hidrofób csoportokat tartalmazó molekulákkal elvégzett funkcionális hatékonyaságát diszpergálási kísérletekkel és SEM-felvételekkel bizonyították. Sikerült olyan molekulákat találniuk, amelyek alkalmazásával stabilizálni lehetett nanocsövek vizes és szerves oldószeres diszperzióit.

Egyes molekulákkal nem diszpergálást értek el, hanem a nanocső-kötegek szerkezetét, morfológiáját tudták stabilizálni. Megoldották a vizes és a szerves típusú módosítások stabilizálását. Különböző szerves reakciók segítségével olyan felületmódosított szén-nanocsöveket állítottak elő, amelyek elősegítik a műanyagokba való homogén bekeverést és növelik az elektromos vezetőképességet.

Szén gőzfázisú leválasztásával sikerült szilícium felületeken tömör, gyémánt-védőréteget kialakítaniuk. Kimutatták, hogy a keletkezett réteg hatékonyan védi a szilícium felületét, ezért az eljárás várhatóan fémek esetében is alkalmazható lesz. A korrózióval szemben a védőréteg csak akkor lesz hatékony, ha összefüggő és tömör. Az említett tényt műszeres vizsgálatokkal is igazolták.

Kutatói kapacitás: 14,5 fő, ebből intézeti állományban: 11 fő. Teljes ráfordítás: 55,2 M Ft, ebből pályázati forrás: 26,2 M Ft.

Folytatták az alkil-ón vegyületekkel végzett katalizátormódosítás tanulmányozását a fő hangsúlyt a Pt-Re/Al₂O₃ kétfémes katalizátorokra, valamint az SnO_x nanoréteget tartalmazó hordozók előállítására helyezve. Kimutatták, hogy az ón-tetraetillel történő módosítás eredményeként három fémet tartalmazó Sn-Pt-Re nanoklaszterek képződnek. Az ily módon kialakított hordozós katalizátorokat benzin reformálásában vizsgálták. Kimutatták, hogy az ón bevitelével jelentősen csökkenthető a reformált benzin aromástartalma.

SnO_x nanoréteget vittek fel SiO₂, Al₂O₃, MgO és TiO₂ hordozókra. Az így kialakított hordozókon nanoméretű aranyklasztereket stabilizáltak. Az előállított új típusú hordozós aranykatalizátorokat CO alacsony hőmérsékletű oxidációjában vizsgálták.

Szénmonoxid alacsony hőmérsékletű oxidációját tanulmányozták mind hidrogén jelenlétében, mind anélkül. Ezekben a vizsgálatokban egyrészt különböző módszerekkel előállított Sn-Pt/SiO₂, Au/MgO, Au/Al₂O₃ és módosított Fe/MCM-41 katalizátorokat alkalmaztak, másrészt új típusú hordozós aranykatalizátorokat állítottak elő átmenetifém spinelleket alkalmazva katalizátorhordozóként. A kapott eredmények egyértelműen bizonyították a redox típusú módosítók aktivitás növelő szerepét. A CO oxidációját nagy áteresztőképességű reaktorokban is vizsgálták. A kinetikai vizsgálatok rámutattak a hidrogén aktivitást növelő szerepére. Valószínűsítették, hogy a hordozós aranykatalizátorokon a CO oxidációjának mechanizmusa eltérő 273 K alatt, szobahőmérsékleten, illetve 350 K fölött.

A CO molekula és a karbonilvegyületek heterogénkatalitikus aktiválásában további bizonyítékokat kaptak a „fémion-fém nanoklaszter” aktív hely együttesek szerepére a PtRe, a RuSn, a RuPtRe, a Fe/MCM-41 és a redox típusú fénoxidokkal módosított hordozós aranykatalizátorokon.

Folytatták a piroszőlősav-etilészter és különböző diketonok heterogénkatalitikus aszimmetrikus hidrogénezését. Vizsgálták az akirális terciér aminok enantioszelektivitást növelő hatását, valamint az izocinkoninek anomális viselkedését aprotikus oldószerben.

A metán alacsony hőmérsékletű oxidációját kombinatorikus úton tervezett, többkomponensű katalizátoron vizsgálták. Kimutatták a kismennyiségű arany promotor hatását a Pt-Pd/CeO₂ katalizátorok aktivitásának növelésében.

Összehasonlították a kombinatorikus-katalízis kutatásokhoz kidolgozott informatikai rendszerüket (Holografikus Kutatási Stratégia, HRS) az irodalomban ismert módszerekkel. Kimutatták, hogy a HRS gyorsabb és megbízhatóbb módszer katalizátorkönyvtárak előállítására, mint a legelterjedtebben alkalmazott Genetikus Algoritmus.

Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 9 fő. Teljes ráfordítás: 45 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,3 M Ft.

Szilícium-dioxid mellett átmeneti fémet, alumíniumot, vasat, rezet és kobaltot tartalmazó, MCM-41-szerkezetű anyagokat szintetizáltak. A szintézist úgy vezették, hogy a 25-100 nm hosszúságú, hexagonális elrendezésű, 2-2,5 nm átmérőjű párhuzamos csatornákat, azaz nanopórusokat magukba foglaló részecskék 50-100 nm átmérőjű gömböcskéket formáljanak. Mechanizmust javasoltak a gömb-morfológia kialakulására. Kimutatták, hogy az alumínium vagy a vas beépülése a szilícium-dioxid szerkezetbe Brønsted- és Lewis-savas helyek képződését váltja ki a nanopórusokban. Maguk az átmenetifém ionok redoxi típusú, katalitikusan aktív centrumok. Különböző reakciókban jellemezték a szabályos és egységes méretű nanopórusokban elhelyezkedő savas és a redoxi centrumok katalitikus aktivitását és szelektivitását.

Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 45 M Ft, ebből pályázati forrás: 13,5 M Ft.

Korróziógátló hatású, önszerveződő és Langmuir-Blodgett monorétegek szerkezetét határozták meg összegfrekvencia-keltési spektroszkópia segítségével.

Felületi tulajdonságaikban módosított üvegeket vizsgáltak. Tanulmányozták a hidrofobicitás és a felületi szerkezet közötti kapcsolatot.

Tenzidelegyek oldat/levegő határfelületi viselkedését tanulmányozták. Összegfrekvencia-keltési spektroszkópia alkalmazásával megállapították, hogy hosszú oldallánccal rendelkező katanionos tenzidek esetén egy határfelületi elsőrendű fázisátalakulás jön létre.

Aminosavak adszorpcióját tanulmányozták oxidos Ti és kvarcüveg felületen. Megállapították, hogy a savas oldalláncot tartalmazó aminosavak irreverzibilisen adszorbeálódnak TiO_2 felületre, míg a semleges oldalláncúak vizes öblítéssel eltávolíthatók.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Teljes ráfordítás: 16 M Ft, ebből pályázati forrás: 0,5 M Ft.

Beszámoló egy kiemelt kutatási eredményről:

Kombinatorikus heterogén-katalitikus kutatások

Korunk erőteljesen fejlődő kémiai kutatási irányzatai egyre inkább alkalmazzák a kombinatorikus megközelítéseket és módszereket. A kombinatorikus, illetve nagy áteresztő-képességű módszerek közös jellemzője a nagyszámú minta párhuzamos előállítása, illetve párhuzamos vizsgálata anélkül, hogy bármelyik részlépés a teljes folyamat szűk keresztmetszetét jelentené. Ezért helyeztek munkájukban az intézet kutatói egyre nagyobb hangsúlyt a katalízis és anyagtudomány területén használható kombinatorikus, illetve nagy áteresztőképességű módszereket alkalmazó eszközök kifejlesztésére és alkalmazásának vizsgálatára.

A kombinatorikus módszerek katalitikus optimalizálási feladatok megoldására igen jól alkalmazhatók. Hasonlóan a biokémiai kombinatorikus kutatásokhoz, itt is anyagkönyvtárakat, pontosabban katalizátorkönyvtárakat hoztak létre. „Katalizátorkönyvtár” alatt tulajdonképpen a katalizátorösszetétel többdimenziós kísérleti terének adatait értjük. Az intézet kutatói olyan katalizátorkönyvtárak tervezését végzik, amelyek tagjai többkomponensű szilárd anyagok. Ezek csak összetételben különböznek egymástól.

A katalizátorkönyvtárak tervezéséhez szükséges új és hatékony optimumkereső algoritmusok létrehozása kulcsfontosságú. A kutatócsoport kifejlesztette az úgynevezett Holografikus Kutatási Stratégiát (HKS), ami egy új optimalizáló algoritmus. Ezen a területen jelenleg még „egyeduralkodónak” számít a Genetikus Algoritmus (GA), ami véletlenszerű elemeket alkalmaz. Ezzel szemben a HKS determinisztikus eljárás, ami hatékonyabb optimalizálást tesz lehetővé, mint a GA.

A HKS a többdimenziós kísérleti tér speciális, kétdimenziós leképezésén alapul. A transformációban képződő, ún. kísérleti hologramok számos analógiát mutatnak a hagyományos értelemben vett optikai holografikus képekkel. A kísérleti hologramok kis részletei is tartalmaznak információt a teljes térről és a teljes tér folytonos leképezésének tekinthetők. Kísérleti hologramok esetén a dimenziókat a katalizátorok különböző komponensei jelentik, amik száma általában háromnál több. Az ábrázolásmód jellemzője, hogy a komponenseket a kétdimenziós tér X és Y tengelye mentén számos variációban rendezhetjük el, amelyek más és más kísérleti hologramhoz vezetnek. A kísérleti hologramok képpontjai, a tengelyeken meghatározott összetételhez tartozó katalizátorok aktivitását jelenítik meg általában különböző színekkel. Így a kapott kép leginkább egy domborzati térképhez hasonlít.

A holografikus optimalizálás iteratív jellegű. A következő generáció katalizátorait a megelőző lépésben kapott eredmények határozzák meg. A kísérleti hologramban elhelyezzük a

megelőző lépésekben kapott eredményeket, majd ezt az elrendeződést első lépésben az X és Y tengelyen található komponensek pozíciójának cseréjével (forgatásával) megváltoztatjuk. Ily módon a „képpontok” új környezetbe kerülnek. Második lépésben a katalitikusan legjobbnak bizonyuló adatpont környezetében vesszük fel az új generáció katalizátorait. Az algoritmus a fenti lépések ismétlődése révén egyre közelít az optimum felé.

Ki kell emelni a komponensek X és Y tengely menti forgatásának jelentőségét. Mivel ez megváltoztatja a képpontok elrendeződését, azok új környezetbe kerülnek, ahol eddig még nem vizsgált katalizátorok találhatóak. Azt is mondhatjuk, hogy a komponens forgatása a holografikus optimalizálás hajtóereje.

A HKS-t sikerrel alkalmaztuk a Mesterséges Neurális Hálózatokkal (MNH) összekapcsolva mind optimalizálásra, mind többdimenziós kísérleti terek feltérképezésére, azaz információnyerésre („information mining”). A MNH-k szerepe ezekben az esetekben a katalizátorok összetétele és aktivitása közötti mennyiségi összefüggés feltárása. Segítségükkel tulajdonképpen virtuális kísérleteket hajthatunk végre. A MNH-k viselkedése ebben az értelemben egy fekete dobozéhoz hasonlítható, amelynek bemeneti adatai a komponensek koncentrációi, míg a kimenetén az ehhez az összetételhez tartozó aktivitásérték jelenik meg. Hasonló célra polinomok is alkalmazhatók, de a neurális hálók óriási előnye a polinomokkal szemben, hogy megfelelő kialakításukhoz lényegesen kevesebb előzőleg megmért kísérleti pontra van szükség.

Az előzőekben bemutatott hatékony informatikai hátteret a kutatás hardver eszközei egészítik ki és teszik alkalmazhatóvá. A nagy áteresztőképességű tesztelést egy a csoport által kifejlesztett 16-csatornás reaktorrendszer biztosítja. Magának a reaktornak a felépítése egyenletes hőmérséklet- és áramláselosztást biztosít mind a 16 csatornában, amit könnyen szabályozhatunk. A reaktornak egy bemenete és a 16 csatornának megfelelően 16 kimenete van. A katalitikus reakció eredményeképpen a bementi gázáram összetétele megváltozik, amit a kimeneteknél távozó gázelegy folyamatos elemzésével követhetünk nyomon. Egy 16-állású szelep választja ki a csatornákat, amelyeket így periodikusan vizsgálnak tömeg-spektrométerrel. A katalizátorok előállítását automatizálták, robottechnikát alkalmazva. Saját fejlesztésű folyadékiosztó robot segítségével a kívánt prekursor vegyületeket tetszőleges koncentrációban lehet összekeverni.

A katalizátorkönyvtárak tervezésének lépéseit egy környezetvédelemmel kapcsolatos esettanulmányban vizsgálták, ami többkomponensű katalizátorok optimalizálására irányult metán teljes oxidációjában. A földgázzal működő járművek egyre nagyobb számban jelennek meg, s így az elégni nem képes metán emissziója évről-évre nő, ami erősíti az üvegházhatást. A cél olyan, újszerű katalitikus anyagok előállítása, továbbá tesztelése kombinatorikus úton, amelyek alacsony hőmérsékleten működnek, nagy aktivitással égetik el a kis koncentrációjú metánt és ellenállóak a füstgázokban előforduló kénszennyezésre és vízgőzre. A kezdeti katalizátorkönyvtárban mutatkozó legjobb katalizátoron csak 44 %-os metán konverziót mértek, míg 167 katalizátor tesztelése után az 5. generációban találtak egy olyan katalizátort, amelyen már a metán teljes átalakulását tapasztalták. Többkomponensű katalizátorok összetétele és aktivitása közötti összefüggések feltárásához MNH-k nemlineáris illesztését végezték el a rendelkezésre álló adatsoron, majd ezt a matematikai szerkezetet transzformálták könnyen érthető kétdimenziós hologramokká. Ezzel lehetőség nyílt a teljes kísérleti tér megjelenítésére. Az ábrák tanulmányozásával világos képet kaptak a vizsgált heterogén katalitikus rendszerről, így a MNH-k alkalmazása gyorsítja a további optimalizálást, hiszen elkerülhető a katalitikusan feltehetően inaktív anyagok előállítása és vizsgálata.

Feltehető, hogy a jövő autóiban a hidrogén fontos szerepet fog játszani, mint üzemanyag, amelyet azonban meg kell tisztítani a benne nyomokban előforduló szénmonoxidtól. Ehhez a CO szelektív oxidációja szükséges az elegyben jelenlevő hidrogén oxidációja nélkül. Az intézet kutatócsoportja már megkezdte a kinetikai vizsgálatokat spinell-hordozós, aranytartalmú katalizátorok jellemzésére CO szelektív oxidációjában. A 16-csatornás reaktorban a vizsgálatok hatékonyabban hajthatók végre, mint a hagyományos átáramlásos reaktorban. Ezek a kutatások jelentősek a kombinatorikus módszerek további fejlesztését és alkalmazását célzó munkáikban.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézetnek 2004-ben, csakúgy mint korábban, igen szerteágazó és szakmailag mindegyik résztvevő számára eredményes kapcsolatai voltak különböző egyetemi tanszékekkel. A közös kutatások eredményeiről 2004-ben hét publikáció jelent meg. Együttműködtek mind katalíziskutatási, mind felületkutatási (nanotudományi) témákban a BME, az ELTE, a Veszprémi és a Szegedi Egyetem megfelelő tanszékeivel, illetve akadémiai kutatócsoportjaival. Az intézet jelentős mértékben kiveszi részét – mind elméleti tárgyak oktatásával, mind gyakorlatok vezetésével, illetve a doktoranduszi képzésben való közreműködésével – az egyetemi oktatómunkából a Veszprémi Egyetemen és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen. A kutatók közül 8 fő vesz részt rendszeresen az egyetemi oktatásban. 2004-ben az intézetben 9 fiatal kutató dolgozott PhD munkáján.

Eredményesek voltak 2004-ben is azok a tudományos kutatásokra alapozott alkalmazott kutatások, amelyeket hazai fejlesztő intézményekkel és vállalatokkal folytattak. Ezek közül kiemelendő a Szilikát és Kerámia Anyagkutató és Fejlesztő Kft-vel sikeresen befejezett „A katalitikus paraffinátalakító állóágvas DEW katalizátor gyártási technológiájának továbbfejlesztése” c. projekt.

Az intézet, a korábbi évekhez hasonlóan sikeres együttműködésekkel folytatott számos témában külföldi kutatóhelyekkel. A közös kutatások 2004-ben 14 publikációt eredményeztek.

Különösen eredményesek voltak az Edinburgh-i Egyetemmel „Új szén/zeolit kompozit anyagok előállítása és jellemzése” (5 közlemény és 2 konferenciaelőadás), a BTA-MTA-egyezmény keretében a Bolgár Tudományos Akadémia Szerves Kémiai Intézetével „Új típusú zeolitok és zeolitszerű anyagok előállítása és szilárd fázisú módosítása” (4 közlemény és egy előadás), valamint az „NO_x szelektív katalitikus redukálása szénhidrogénnel, különféle zeolit alapú katalizátorokon” c. témában (egy közös cikk és egy előadás) és a Santa Fe-i Egyetemmel (Argentína) (TÉT-együttműködés keretében) folytatott közös kutatások. Jelentősek a tudományos kooperációk a következő kutatóhelyekkel is: University of Pittsburgh az „Sn-Pt/SiO₂ katalizátorok alkalmazása a környezetvédelemben”, University of Concepción (Chile) az „Aszimmetrikus hidrogénezési reakciók tanulmányozása”, Instituto de Investigaciones en Catalisis y Petroquímica (Argentina) a „Nanostrukturált kétfémes hordozós katalizátorok előállítása és vizsgálata”, Lille University of Sciences and Technologies Laboratory of Catalysis (Franciaország) a „Többkomponensű katalizátorok előállítása szénhidrogén reakciókhoz”, Raluca Ripan Chemical Research Institute, Cluj (Románia) az „Ön-oxid nanorétegek előállítása, jellemzése és alkalmazása elektrokémiai szenzorok kifejlesztésére” c. témákban.

Megemlítendő továbbá, hogy a Román és a Magyar Tudományos Akadémia közötti együttműködési egyezmény keretében a „Környezetbarát, vékonyrétegű, nanokristályos

ónoxid bevonatok” c. témában több tanulmányutat bonyolítottak le 2004-ben és egy közös cikk is született.

Több témában kölcsönös tanulmányutak révén jelenleg folyik a publikációk véglegesítése. Így pl. a következőkben: „Rozsdamentes acélok előkezelése és a korróziót előidéző anaerob mikroorganizmusok megtapadása közötti összefüggések” (Universidade de Lisboa, Portugália), „Nanocsövek kémiai tulajdonságainak modellezése, illetve nanocsövek elektronszerkezete” (National Institute of Chemistry, Ljubljana, MTA-Szlovén Tudományos Akadémia közötti szerződés).

Az intézet kutatói 2004-ben összesen 64 külföldi kiutazáson vettek részt.

Néhány külföldi társaság fejlesztései részben az intézetben végzett tudományos munkára alapozódnak. Anyagi szempontokból is jelentős például a Petroleum Research Centre-vel folytatott együttműködés (Líbia). A nevezett intézmény részére: „Korróziós inhibitorok és biocidok kifejlesztése”, valamint „Kombinatorikus módszerek alkalmazása katalizátorok tervezésére” c. témakörökben folynak kutatások.

Az intézet kutatói közül többen fontos nemzetközi tudományos bizottságoknak a tisztségviselői, így pl. a következőknek: International Society of Electrochemistry, Európai Korróziós Szövetség, Electrochemical Society (USA), International Geothermal Association, COST Nanostag (Strategic Forecast) munkabizottság, European Federation of Catalysis Societies (EFCATS).

Az intézet kutatói a következő nemzetközi folyóiratok szerkesztőiként, illetve szerkesztő-bizottságának tagjaként reprezentálják a magyar tudományt: Corrosion Reviews; Corrosion Engineering, Science and Technology; Materials and Corrosion; J. Electrochemical Society; Croatica Chemica Acta.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet felületkutatással foglalkozó csoportjainak tematikája a legkorszerűbb irányzatokhoz kapcsolódik. Az intézet által koordinált, a nanotudományok rendkívül sokrétű és szerteágazó területét felölelő projekt, három évre 110 Mft támogatást élvezett. „A különleges tulajdonságú, nanoszerkezetű bevonatok fejlesztése környezetbarát felületmódosítási eljárásokkal” c. projekt (NANOTECH) keretében fémfelületeken olyan komplex, nanostrukturált bevonatrendszereket dolgoztak ki, amelyek ellenállóak a legkülönbébb külső hatásokkal (mechanikai, tribológiai, korróziós) szemben. Korszerű felületmódosító eljárásokat vezettek be, a jelenleg használatos felületkezelési technológiákat új, környezetbarát eljárásokkal fejlesztették tovább. Nanoszerkezetű, speciális tulajdonságú, többretegű bevonatrendszereket alakítottak ki szol-gél technikával, a molekulák önszerveződése alapján, nem-egyensúlyi elektrokémiai eljárásokkal, CVD-, PVD-módszerekkel és lézeres felületmódosítással. Ipari hasznosításra alkalmas, önszerveződő molekulákat tartalmazó, korrózióvédő alapanyagokat fejlesztettek ki.

Az intézet kutatásaiban jelentős szerepük van az NKFP, illetve a GVOP-programoknak. Ezeket széles körű együttműködésekben végzik. A K+F-munka mind katalitikus technológiák vizsgálatára, mind funkcionális nanoszerkezetek, illetve nanokompozit-anyagok kutatására kiterjed.

Az intézet nemzetközi együttműködési projektjei jelentős mértékben hozzájárulnak ahhoz, hogy erőteljesebben kapcsolódjanak be az európai kutatási térség munkájába. A korábbi eredmények alapján olyan kapcsolatokat sikerült kialakítaniuk, amelyek lehetővé tették, hogy az intézet a következő időszakban fontos témákban koordinátor, illetve partner lehessen. A témák közül kiemelendő a számos résztvevővel folytatott nanotudományi együttműködés.

Környezetvédelmi szempontból jelentősek a hatékonyabb és egyszerűbb szennyvíztisztítási eljárások kidolgozását célzó EU-program keretében elért eredmények.

A „Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences” projekt keretében lehetőség nyílt egy virtuális Magyar Nanotudományi Központ kiépítésére, továbbá arra, hogy ösztönözzék a hazai K+F-helyeket az európai együttműködésekben való aktív részvételre, előmozdítsák a kutatók-fejlesztők információcseréjét és a fiatal kutatók szakmai továbbképzését. A programban résztvevő külföldi kutatóhelyekkel a nanotudományok területén igen hasznos és eredményes kapcsolatokat sikerült kialakítaniuk.

A projektben részt vesz az intézet koordinálásában a BME, az ELTE, a Miskolci Egyetem, a Debreceni Egyetem, a Szegedi Egyetem, a BAYATI, továbbá a SciTech Link, SE, SME (Svédország), a Tel Aviv University (Izrael), az NMRC, Cork, IRE PRP, RES (Írország), a Lund University (Svédország), az Atomic Energy Commission, Grenoble (Franciaország) és a University of New Castle (UK).

Az elnyert pályázatoknak jelentős hatása van a kutatások interdiszciplináris jellegének erősítésére, új témák indítására, korszerű kutatási profil kialakulására, a hazai- és a nemzetközi együttműködések erősítésére, további EU-pályázatokon történő részvételre.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Simándi TM, Simándi LI, Győr M, Rockenbauer A, Gömöröy Á: Kinetics and mechanism of the ferroxime(II)-catalysed biomimetic oxidation of 2-aminophenol by dioxygen. A functional phenoxazinone synthase model, Dalton Transactions, (7), 1056-1060 (2004)
2. Szőcs E, Bakó I, Kosztolányi T, Bertóti I, Kálmán E: EC-STM study of 5-mercapto-1-phenyl-tetrazole adsorption on Cu(111), Electrochimica Acta, 49, 1371-1378 (2004)
3. Margitfalvi JL, Góbbölös S: Role of 'metal ion-metal nanocluster' ensemble sites in activity and selectivity control, In: Catalysis 17, The Royal Society of Chemistry, 2004, pp 1-104
4. Ulla MA, Gutierrez L, Lombardo EA, Lónyi F, Valyon J: Catalytic features of Pt,Co-mordenite for the SCR of NO_x monitored by DRIFT spectroscopy using adsorbed N₂ as a probe, Applied Catalysis A: General, 277, 227-237 (2004)
5. Pásztai Z, Wang J, Clarke ML, Chen Z: Sum Frequency Generation vibrational spectroscopy studies of protein adsorption on oxide-covered Ti surfaces, Journal of Physical Chemistry B, 108, 7779-7787 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet

Átlaglétszám ¹ :	58	Ebből kutató ² :	39
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			14
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			54
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			54
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	28	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	-
nemzetközi együttműködés keretében:	14	SCI által regisztrált folyóiratban:	21
összesített impakt faktor:	45,786	összes hivatkozás száma ⁴ :	480
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			411
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	9
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	30	poszterek száma ⁶ :	17
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		256,081 MFt	
Beruházási támogatás:	17,489 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	1
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			15
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	19,267 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			22
NKFP:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	73,153 MFt
Egyéb:	18	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	25,832 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			7
EU forrásból:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	52,995 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			3
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,164 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			4,471 MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet

A SzIKKTI Kft. és az MTA Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet konzorciuma az OMFB támogatásával folytatott „A katalitikus paraffin átalakító állóágyas DEW katalizátor gyártási technológiájának továbbfejlesztése (DEWPRO)” c. kutatási-fejlesztési projektet 2004-ben befejezte. Az MTA KK FKI Mikro és mezopórusos anyagok osztálya kutatási eredményeire alapozva, új gyártási technológiával a SzIKKTI Kft. 6000 kg katalizátort gyártott le a MOL Rt. gázolajok dermedéspontjának katalitikus csökkentését megvalósító GOK-3 üzeme részére a 2004-ben esedékes üzemi katalizátor cseréjéhez. A korábban alkalmazottnál kedvezőbb aktivitású zeolitkatalizátor lehetővé teszi a MOL Rt. számára, hogy versenyképes ajánlattal pályázzon új, hasonló üzemek létesítésére.

A kutató-fejlesztő konzorcium elérte, hogy a zeolitmátrix szerkezetének változtatásával a fejlesztés tárgyát képező, Ni-tartalmú bifunkciós zeolitkatalizátorok alkán krakkolási/izomerizálási szelektivitását tervezhető módon lehessen változtatni. Egy új alkán hidroizomerizációs katalizátorból piackutatásra alkalmas mennyiséget, 1000 kg-ot gyártottak.

Kémiai Kutatóközpont
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67. 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 325-9040, Fax: 325-5990
e-mail: palg@chemres.hu, honlap: <http://www.chemres.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Szerkezeti Kémiai Intézet fő feladata 2004-ben a következő volt:

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a molekulák és a szupramolekuláris szerkezetek sajátságainak különböző spektroszkópai és diffrakciós mérési módszerekkel, továbbá elméleti kémiai vizsgálatokkal történő feltárására.

Az intézet további feladatai voltak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Kimutatták, hogy az ionos folyadékok kiválóan alkalmasak micellák tulajdonságainak megfelelő módosítására a felhasználási igények szerint. Oktilcsoportot tartalmazó ionos folyadékok vizes oldatában aggregálódást vagy micellaképződést tapasztaltak, ami környezetvédelmi szempontból is fontos lehet.

A molekulaszervezet és a fotofizikai folyamatok sebessége közötti kapcsolat szisztematikus vizsgálatának eredményeként egy olyan anyagot (1-hidroxi-fluorenon) találtak, melynek fluoreszcenciás sajátságai nagymértékben függenek a mikrokozmosztól, hidrogénhíd kötésre képes vegyületek jelenlététől, így jól alkalmazható jelzőanyagként. Előállítottak egy új naftálimid származékot (N-(4-piridil)-1,2-naftálimid), mely protonálódás hatására nagy határfokkal fluoreszkál, és ezáltal már nyomnyi mennyiségű sav is kimutatható segítségével. Naftalin jelenlétében e vegyület kettős fluoreszcenciát bocsát ki. Igazolták, hogy e jelenség gerjesztett állapotú komplex képződéséből ered. Feltárták, hogyan hatnak a hidroxilcsoportot tartalmazó vegyületek a gerjesztett komplex képződésének és energiavesztésének kinetikájára.

Fontos mérés-technikai fejlesztéseket hajtottak végre platina-, palládium- és óntartalmú, szupramolekuláris szerveződéssel jellemezhető fémorganikus vegyületek szerkezetvizsgálatában. Méréseik kiterjedtek a szupramolekulák transzlációs diffúziós sajátságainak, továbbá molekuladinamikai folyamatok energetikájának tanulmányozására. Fejlesztéseik a korszerű egy- és többdimenziós, heteronukleáris diffúziós (DOSY) mérések ^1H - ^{13}C , ^1H - ^{31}P , ^1H - ^{119}Sn magkombinációkon történő hazai meghonosítását, valamint a kémiai kicserélődési folyamatok tanulmányozásához szükséges szelektív inverziótranszfer kísérletek kiértékelésének modernizálását valósították meg.

FTIR-spektroszkópai diagnosztikai módszert dolgoztak ki az emberi szervezet általános fiziológiai állapotának felmérésére. A kiválasztott személyek részletes orvosi vizsgálatai igazolták, hogy különféle betegségek, illetve kezdeti, még tünetmentes stádiumban lévő

elváltozások az alkalmazott spektroszkópai módszerrel detektálhatók. Eredményeik a preventív orvosi diagnosztika területén gyümölcsöztethetők.

FT-IR és Raman-spektroszkópai mérések alapján, valamint skálázott kvantumkémiai erőterekkel végzett teljes rezgési analízis, illetve intenzitászámítások segítségével részletesen értelmezték különböző bonyolultsági fokú szerves vegyületek (benzolszármazékok, arilidén-izokromanonok, elektromosan töltött molekulák) rezgési spektrumait.

Fullerének, magas-hőmérsékletű szupravezetők és zeolitok elektromos és mágneses tulajdonságainak jellemzésére új ESR-spektroszkópai módszereket dolgoztak ki. A C₆₀ mátrix NC59 dópolásával töltéshordozókat vittek be a szigetelőanyagba, amely a megfigyelt elektrondelokalizáció révén lehetőséget kínál új típusú félvezető anyagok kifejlesztésére. A megfigyelt jelenség elvi lehetőséget nyújt kvantumszámítógépek kidolgozására is.

Kutatói kapacitás: 14 fő, ebből intézeti állományban: 10 fő. Teljes ráfordítás: 55 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,3 M Ft.

Gázfázisú vizsgálatok keretében újszerű gyorsáramlásos és lézerfotolitikus módszerek alkalmazásával meghatározták az acetonylgyök (CH₃C(O)CH₂) lézergérsztési (LIF) és tranziens abszorpciós (TA) spektrumát. Sebességi együttható értékeket adtak meg a CH₃C(O)CH₂-gyök O₂-nel, NO-dal, NO₂-dal és H-atommal végbemenő reakciójára, amelyeknek alapján molekulaszervezet–reaktivitás összefüggéseket állapítottak meg. Az LIF- és a TA-spektrumok alkalmasak a légkörkémiában fontos szerepet játszó acetonylgyök nagy-érzékenységű detektálására; a meghatározott kinetikai adatokat pedig légkör kémiai modelljeiben használják fel. Ilyen modellek kifejlesztésében a SCOUT-O3 EU kutatási projekt keretében vesznek részt.

Reakciókinetikai mérésekkel megállapították, hogy az OH-gyök a hangyasav-észterek alkilcsoportjának hidrogénatomját hasítja le, szemben a várt formil H-atom absztrakcióval; eredményeiket kvantumkémiai számításokkal támasztották alá.

Oldatfázisú vizsgálatok keretében fontos eredményeket értek el a hidrogénhidas komplexek termodinamikájával és képződésük kinetikájával kapcsolatban. Fenantridinon és N-naftálimid származékok fotofizikai vizsgálatai alapján általánosítható következtetésekre jutottak. Megállapították, hogy a komplexálódás hatására megváltozik a szingulett gerjesztett állapot energiája. A fellépő szingulett energiaváltozás lineárisan függ a komplexképződés egyensúlyi állandójának logaritmusától. Az összefüggést egyszerű modellek segítségével értelmezték, amelyeknek felhasználásával eljárást dolgoztak ki a szingulett gerjesztett állapot hidrogénhidas savasságának és ezen keresztül a reakciók szabadentalpia változásának becslésére. A szabadentalpia-változás ismeretében korrekt módon kiértékelhetők a komplexálódás folyamatát jellemző fluoreszcencia-lecsengési paraméterek, becsülhető az alapállapotú komplexálódás és a komplex elbomlásának a sebessége.

Kutatói kapacitás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Teljes ráfordítás: 48 M Ft, ebből pályázati forrás: 9,6 M Ft.

Olyan instabilis Pd- és Pd-Pt dimereket izoláltak és jellemeztek kristálydiffrakciós módszerek segítségével, amelyekről korábban csak folyadék NMR-adatok álltak rendelkezésre. Elvégezték a di(*p-tert*-butilfenil)-*N,N*-di-(*izo*-butil)karbamoilmetilfoszfin oxid (a Los Alamos National Laboratory-ban használt „aktinida extraktor”) és organoón-, illetve uranilkomplexeinek teljes szerkezeti és spektroszkópai jellemzését. Vizsgálták a triorganoón(IV)-vegyületek kétfogú O,O/N-donor ligandumokkal mutatott önszerveződési reakcióját irányító

tényezőknek a képződő termékekre gyakorolt hatását. Megállapították, hogy szilárd fázisban a triorganoón(IV)-tetramer diorganoón(IV)-dimerré alakul metilcsoport-vándorlással járó diszmutációs reakcióval.

Rendszereztek a réz- és ón-tiokarbamid komplexek szerkezeti típusait.

Jellemezték a teofillin zárványvegyületeinek szerkezetét.

Tanulmányozták az izostrukturalitás előfordulását polimorf rendszerekben, leírták egy aliciklusos beta-laktám 3-dimenzióban izostrukturális polimorfjait.

Meghatározták a kristálytervezésben fontos H-híd-kölcsönhatás különbségek várható nagyságát. Előállították és vizsgálták nagy pórusú, kristályos, háromfogású szimmetriájú gazdavegyületek rendszereit és meghatározták kristályszerkezetüket.

Kutatói kapacitás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Teljes ráfordítás: 49 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.

Hazai együttműködésben meghatározták egyes katalitikus hatású katekoláz vaskomplexek szerkezetét röntgendiffrakcióval és sűrűségfukcionál-számításokkal. Jellemezték a komplexek kinetikai viselkedését. Ilyen jellegű vizsgálatokat eddig még nem írtak le az irodalomban, a módszernek potenciálisan komoly hatása lehet a katalíziskutatásra.

Amerikai kutatókkal együttműködésben vizsgálatokat végeztek egyes önszerveződő szupramolekuláris rendszerek (makrociklusos platinakomplexek) szerkezetének meghatározására, a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzésére. A vizsgálat az előzőhöz hasonlóan úttörő jelentőségű.

Osztrák együttműködésben (TÉT) ab initio számításokat, molekuláris dinamikai szimulációkat, röntgendiffrakciós és neutrondiffrakciós méréseket végeztek Li^+ és Be^{2+} iont tartalmazó oldatokon (acetonitril és dimetilszulfoxid oldószerekben). Az eredményekről három közös közlemény már megjelent.

Folytatták a nagynyomású röntgendiffrakciós- és sűrűségméréseket a metanol szerkezetének felderítésére 100 bar-3 kbar nyomáson. Az adatok kiértékelése jelenleg folyik.

Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Teljes ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,2 M Ft.

A tömegspektrométerben lejátszódó folyamatok modellezésére kifejlesztett Windows-alapú számítógépes programot (MassKinetics), aminek népszerűségét a több mint 950 regisztrált felhasználó jelzi, 2004-ben továbbfejlesztették. A programot sikeresen alkalmazták protonált dimerek entrópiaeffektusainak vizsgálatára. Számításaik segítségével meghatározták, hogy az ún. kinetikus módszer milyen feltételek teljesülése esetén alkalmazható és az így meghatározott entrópia mennyire pontos. Eredményeikkel az irodalomban egy már régóta folyó vitát sikerült lezárniuk.

Együttműködve az ELTE és a BME kutatócsoportjaival, különböző szintetikus és izolált természetes vegyületek szerkezetazonosítását végezték el, többek között új típusú perfluoro-alkil láncot tartalmazó heterociklusos, illetve foszfororganikus vegyületekét.

Az újszülöttkori anyagcsere-betegségek szűrésére kidolgozott módszerüket sikeresen alkalmazták: a Budai Gyermekkorház megbízásából több száz csecsemő szűrését végezték el 2004-ben. Az eredményes szűrésnek köszönhetően sok csecsemő szellemi és testi leépülése vált elkerülhetővé.

Az Országos Onkológiai Intézettel megkezdett együttműködés folytatásaként új, tömegspektrometriai alapú diagnosztikai módszert fejlesztenek ki rosszindulatú daganatos megbetegedések korai kimutatására. Kutatásaik során megállapították, hogy a vérben található alfa-1-savas-glikoprotein (AGP) oligoszaccharid részében bekövetkező szerkezetváltozás a rákos megbetegedés kialakulását jól jelzi. A kidolgozott módszert várhatóan fel lehet használni a rákos megbetegedések diagnosztizálásában.

Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 9 fő. Teljes ráfordítás: 54 M Ft, ebből pályázati forrás: 13,5 M Ft.

Kvantumkémiail módszerekkel meghatározták három Ru-bipiridil és Ru-fenatrolin komplex szerkezetét tripllett gerjesztett állapotban.

Klasszikus mechanikai trajektóriaszámításokban megállapították a reakciódinamikában ismert Polányi-szabályok érvényességi határait.

Kimutatták, hogy a Löwdin-féle atomi populációk nem rendelkeznek az elvárható általános rotációs invariancia tulajdonsággal, ami miatt alkalmazásuk jelentős elvi és gyakorlati problémákat vet fel.

Egy új másodkvantált formalizmust javasoltak kölcsönhatások additivitásának és interferenciájának vizsgálatára.

Bevezették az "atomi egységfelbontás" fogalmát, ami lehetővé teszi, hogy a legkülönböző populációs analízis és energiadekompozíciós módszereket egy közös, általános formalizmus keretében vizsgáljuk.

Kvantumkémiail számítások alapján meghatározták a CH_2BrCl UV-fotodisszociációjához tartozó potenciálfelületek közti átmeneti dipólmomentumokat, illetve nem-adiabatikus csatolást.

Periodikus modelleken elvégzett kvantumkémiail számítások segítségével jellemezték a Pd(111), Rh(111) és Pt(111) felületeken adszorbeált molekulák szerkezeti tulajdonságait.

Röntgen- és neutron-diffrakciós mérések, illetve molekuladinamikail számítások alapján pontosították a 2,2,2-trifluoroetanol és a hangyasav folyadékszerkezetét.

Kvantumkémiail számítások segítségével értelmezték azt a kísérleti tapasztalatot, miszerint a $[\text{PdH}(\text{dppe})]^+$ fémkomplex reakcióiban a hidrogénjét mind proton, mind pedig hidrid formában is átadhatja.

Megmutatták, hogy a CO_2 és C_2H_4 molekulák oxidatív C-C csatolásakor a széndioxid fémcentrumhoz történő koordinációja nem szükségszerű elemi lépés, továbbá azt, hogy a C-C kapcsolás aktiválási gátja a segédligandumok módosításával előnyösen szabályozható.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Teljes ráfordítás: 48 MFt, ebből pályázati forrás: 8 MFt.

Beszámoló egy kiemelt kutatási eredményről:

Önszerveződő organoón(IV)-vegyületek szintézise és szerkezeti jellemzése

Az önszerveződő organoón(IV)-vegyületek szintézisével és az ezeknek a koordinációs vegyületek kristályaiban előforduló molekulaelrendeződések szupramolekuláris kémiai szemléletű elemzésével az intézet Egykristálydiffrakciós Laboratóriuma már több mint hét éve foglalkozik. Az utóbbi években az organoón(IV)-szupramolekulák koordinatív kötéseken alapuló spontán önszerveződési reakcióinak tanulmányozása a szerves kémiai kutatások egyik hajtóerejévé vált, hiszen e molekulák alkalmazásával nagy bonyolultságú, kémiailag

egységes koordinációs vegyületek kialakítása lehetséges. Ezeknek, a koordinatív kötésekön keresztül létrejövő önszerveződési reakcióknak a precíz és kontrollált irányításához először az önszerveződő egységek szerkezeti milyenségét (a fém koordinációs helyeinek számát és szimmetriáját, kötésszögét, a ligandum merevségét, stb.) tervezik meg, majd a szintetikus tényezőknek (oldószer, hőmérséklet, koncentráció, templátok stb.) a kialakuló szupramolekuláris szerkezet képződésére gyakorolt hatását derítik fel. Az önszerveződési reakcióban alkalmazandó alegységek szerkezeti sajátosságainak a tervezéséhez a krisztallográfiai adatbázisokat használják, a folyadékfázisú NMR-spektroszkópia modern mérési módszereivel pedig a szintetikus tényezőknek az önszerveződési reakciókra gyakorolt hatását derítik fel. Az oldatbeli molekulászerkezetek megismerése elengedhetetlenül szükséges a kristályképződés törvényszerűségeinek a feltárásához, hiszen az oldatfázisban kialakuló rend döntően meghatározza a kristályképződést és ezáltal a kialakuló szupramolekuláris szerkezet milyenségét. A lehetséges szintézisutak, valamint az alkalmas szerkezetfelderítő módszerek kidolgozása teszi lehetővé az önszerveződő módon előálló organoó(IV)-vegyületek potenciális alkalmazási területeinek feltárását (pl. nanoméretű részecskék gyártása, molekuláris elektronika, elválasztástechnika, katalízis, stb).

Triorganoó(IV)-vegyületek körében végzett kutatásaikra támaszkodva választ kerestek arra a kérdésre, hogy a triorganoó(IV)-kationok kétfogú O,O-donor ligandumokkal mutatott reakciójában milyen tényezők eredményeként keletkezik az egyik esetben ciklikus, máskor pedig nyíltláncú termék. A templáthatás tisztázása érdekében különböző kationok jelenlétében vizsgálták a trimetiló(IV)-kation (Me_3Sn^+) és a kétfogú O,O-donor kupferronato-anion (*N*-nitrozo-*N*-fenil-hidroxi-aminato) (a továbbiakban cupf^-) önszerveződési reakcióját. Azt találták, hogy az NH_4^+ -kationok jelenléte a szupramolekuláris szerveződést mutató tetramer $[\text{Me}_3\text{Sn}(\text{cupf})]_4$ vegyületet kialakulásának, míg a Na^+ -kationok a sztannoxán kötésekön keresztül önszerveződő dimer $[\text{Me}_2\text{Sn}(\text{cupf})_2]_2$ kialakulásának kedveztek. Előző munkáikból ismeretes volt, hogy a dimer a tetramer metanolos átkristályosítása során spontán ligandum redisztribúciós reakcióval képződik, tetrametiló(IV) keletkezése közben. Oldatfázisú NMR-spektroszkópiával vizsgálták különböző oldószereknek a tetramer \rightarrow dimer átalakulásra gyakorolt hatását. Apoláris oldószerekben a tetramer koordinatív kötési monomer egységek képződése közben átszerveződnek. Ez a tetramer \leftrightarrow monomer egyensúly a hőmérséklet változtatásával befolyásolható. A Me_3Sn^+ -kation és a kétfogú O,O-donor benzoato-anion (bz^-) önszerveződési reakcióját NH_4^+ - és Na^+ -kationoknak a jelenlétében is megvizsgálták. Azt találták, hogy mindkét reakció az S-alakú szupramolekuláris szerveződést mutató végtelen hosszú koordinációs polimer, $[\text{Me}_3\text{Sn}(\text{bz})]$, kialakulásának kedvezett.

Egy, a szakirodalomban még le nem írt új, termikusan indukálható, szilárd fázisú átalakulást is azonosítottak, amelynek során egy metilcsoport-vándorlásos dizmutációs folyamatban a $[\text{Me}_3\text{Sn}(\text{cupf})]_4$ tetramer egykristályai $[\text{Me}_2\text{Sn}(\text{cupf})_2]_2$ dimer egykristályokká alakultak. Az időfüggő, szilárdfázisú átalakulás termékeinek molarányát NMR-mérésekkel derítették fel, a képződő egykristályokon röntgendiffrakciós méréseket végeztek. Azt találták, hogy az olvadékból kiváló $[\text{Me}_2\text{Sn}(\text{cupf})_2]_2$ dimer kristályszerkezetében különbözik a hagyományos szintézisből átkristályosítással nyert terméktől.

Tri-, di- és monoorganoó(IV)-vegyületek és számos O,O- és O,N-donor gyógyszermolekula koordinatív kötésekön keresztül megvalósuló önszerveződési reakcióját is tanulmányozták. Az így nyert fémkomplexeken egykristály röntgendiffrakciós és NMR-méréseket végeztek. A mérésekből levonható szerkezeti összefüggéseket peptid, fehérje és DNS-kutatásokban hasznosítják.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézet 2004-ben, a korábbi évekhez hasonlóan, széles körű és eredményes együttműködésekkel folytatott a hazai egyetemekkel. Ezekből a munkákból 35 közös publikáció született. Különösen eredményesek voltak a kooperációk a BME Szerves Kémiai, Általános és Analitikai Kémiai, Fizikai, valamint Szerves Kémiai Technológia Tanszékével, amelyekkel összesen 11, a Szegedi Egyetem Fizikai Kémiai, Gyógyszerkémiai, Szervetlen és Analitikai Kémiai, továbbá Magkémiai Tanszékével, amelyekkel 8, a Veszprémi Egyetem Szerves Kémiai Tanszékével, illetve az MTA-VE Analitikai Kémiai Kutatócsoportjával, amelyekkel 3, illetve 4 közös dolgozatot jelentettek meg.

Az intézet kutatói közül jelentős számban (18 fő) vesznek részt mind az elméleti, mind a gyakorlati tárgyak oktatásában a következő egyetemeken: Veszprémi Egyetem, ELTE, BME, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Debreceni Egyetem. Jelenleg 7 PhD ösztöndíjas dolgozik az intézetben.

Hazai kapcsolataik között jelentősek a más MTA-intézetekkel, kutatócsoportokkal, továbbá kórházakkal folytatott együttműködések. Kiemelendő a Heim Pál Gyermekkorházal és az Országos Onkológiai Intézettel kialakított kooperációjuk orvosi diagnosztikai kutatásokban. Alapvetési eredményeiket jól hasznosítják ipari szerkezetfelderítési problémák megoldásában. A következőkben felsorolt hazai vállalatokkal dolgoznak közös feladatokon: Chinoin, Biogal és EGIS Gyógyszergyár Rt, Biomedicina Rt.

Az intézet nemzetközi tudományos együttműködései igen sikeresek voltak 2004-ben is. Összesen 34 tudományos publikációt jelentettek meg a közös munka eredményeiből. Az együttműködések közül külön kiemelendők a következő intézményekkel folytatott kutatások: Université de Provence, Marseille, amellyel két közös publikáció és egy előadás készült, a The Ohio State University, Columbus, amellyel egy közös cikket jelentettek meg.

Megemlítendő továbbá a Helsinkii és a Stockholmi Egyetem, amellyel MTA-egyezményes kutatások során két-két közös cikk, az Universitat Innsbruck Ionfizikai Intezete (TET együttmukodes), amellyel harom publikacio, valamint a Technische Universitat, Munchen Szervetlen Kemiai Tanszeke (TET-DAAD-egyezmeny), illetve az Elemento-organikus vegyuletek Nesmeyanovrol elnevezett intezete (Oroszorszag), a Notre-Dame de la Paix Egyetem, Namur (Belgium) es a Bolgar Tudomanyos Akademia Szerves Kemiai Intezete (Szofia), amelyekkel a megfelelo akademiai egyezmenyes kutatasok eredmenyul tobb kozos eloadast tartottak nemzetkozsi konferenciakon 2004-ben. Fontos partneruk a Max-Planck-Institut fur Biophysikalische Chemie, Gottingen, a University of Cape Town, a University of Texas at El Paso, az Universidad Extremadura, Badajo (Spanyolorszag), a University of Lodz es a Babes-Bolyai Tudomanyegyetem, amely intezmenyekkel egy-egy, es a Technische Universitat, Freiburg, amellyel harom kozos publikaciot jelentettek meg 2004-ben.

MTA-NSF-OTKA projekt keretében egy kutató 3 hetet toltott a Northwestern University Kemiai Tanszeken, Evanstonban (US). Az együttmukodes eredmenyekent sokatomos molekulak reakciodinamikai vizsgalatara szamitogepes programot dolgoztak ki, amelyet konferencian is bemutatottak. Kozos Marie Curie Training Network palyazatot nyujtottak be a Perugiai Egyetem Kemiai Tanszekevel. Ket olasz kutato 1-1 honapot toltott az intezetben es a SzTAKI-ban a reakciodinamikai programok parhuzamositasa c. tema keretében (COST Action D23).

Az intézet kutatói 2004-ben összesen 82 alkalommal vettek részt konferenciákon, illetve tanulmányutakon.

Jelentős szakmai sikert hozott a Central European Symposium on Quantum Chemistry megrendezése 2004-ben Tihanyban, valamint a 14th Informal Meeting on Mass Spectrometry nemzetközi konferencia, amelyet 2004-ben Padovában rendeztek meg (az intézet a rendezvény társszervezője volt).

Az intézet nemzetközi kapcsolatainak jelentőségére mutat az is, hogy részt vesznek a COST három különböző bizottságának munkájában és más jelentős nemzetközi, illetve hazai tudományos szervezetek irányításában is (pl. Európai Fotokémiai Társaság Magyar Nemzeti Tagozata, Combustion Institute US Magyar Égéstudományi Bizottság, ICORS International Steering Committee, AMPERE Committee, European Molecular Liquid Society).

Több nemzetközi folyóiratot szerkesztenek, illetve szerkesztőbizottsági tagként tevékenykednek (pl. Croatica Chemica Acta, Asian Journal of Spectroscopy; Journal of Raman Spectroscopy; Vibrational Spectroscopy; Journal of Mass Spectrometry; European Journal of Mass Spectrometry; Journal of Analytical, Environmental and Cultural Heritage Chemistry; Rapid Communications in Mass Spectrometry).

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet arra törekszik, hogy olyan korszerű, kémiai szerkezetvizsgáló műszerparkot hozzon létre és vizsgálati módszereket fejlesszen ki, amelyeknek a segítségével mind a hazai, mind a nemzetközi, kiemelt jelentőségű projektek feladatainak elvégzéséhez is hozzá tud járulni.

Az intézet kutatócsoportjai szerkezetkutatási problémák megoldásával eredményesen vesznek részt mind a Medichem I. és II., mind a Center of Excellence for Biomolecular Chemistry EU-programban.

Az intézet igen aktívan dolgozik olyan kooperációs tudományos témákban, amelyekben egyetemi kutatók is részt vesznek. Ezeket a munkákat az OTKA támogatja. A tudományos eredményekről a beszámoló II. fejezetében olvasható tájékoztatás.

A COST D23-as akció (Metachem: metalaboratóriumok kémiai feladatok komplex számítógépes megoldására) keretében a SIMBEX (Molekulasugár kísérletek szimulációja számítógép Griden) munkacsoportban vesznek részt. A munka célja: földrajzilag távoli, számítógépes erőforrások elérhetővé tétele a jobb kihasználás és a nagyobb kapacitás biztosítása végett. A projekthez egy hazai IKTA-projekt is kapcsolódik, amelyben a SZTAKI egyik kutatócsoportjával hazai, kémiai célú számítógéppgridet építettek ki.

Kiemelendők azok a kutatások, amelyek a sztratoszférában lejátszódó, az éghajlatot befolyásoló kémiai folyamatok körülményeinek és okainak feltárására irányulnak egy SCOUT-program keretében. A projekt fontosságát mutatja, hogy különösen nagy (64) a résztvevők száma, s a támogatás mértéke is jelentős.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Villamena FA, Rockenbauer A, Galluci J, Velayutham M, Hadad CM, Zweier JL: Spin trapping by 5-carbamoyl-5-methyl-1-pyrroline N-oxide (AMPO): Theoretical and experimental studies, *Journal of Organic Chemistry*, 69, 7994-8004 (2004)
2. Sebők-Nagy K, Biczók L, Morimoto A, Shimada T, Inoue H: Energy dissipation processes of singlet-excited 1-hydroxyfluorenone and its hydrogen-bonded complex with N-methylimidazole, *Photochemistry and Photobiology*, 80, 119-126 (2004)
3. Skripkin MY, Lindqvist-Reis P, Abbasi A, Mink J, Persson I, Sandström M: Vibrational spectroscopic force field studies of dimethyl sulfoxide and hexakis(dimethylsulfoxide) scandium(III) iodide, and crystal and solution structure of the hexakis(dimethylsulfoxide) scandium(III) ion, *Dalton Transactions*, (23), 4038-4049 (2004)
4. Keszler AM, Nemes L, Ahmad SR, Fang X: Characterisation of carbon nanotube materials by Raman spectroscopy and microscopy - A case study of multiwalled and singlewalled samples, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 6, 1269-1274 (2004)
5. Keresztury G, Holly S, István K, Sundius T, Lóránd T: Analysis of vibrational spectra of some new E- and Z-4-arylidene-3-isochromanones Part 2. Isomers and conformers of the 2'-pyrrolyl and 2'-nitrophenyl derivatives, *Journal of Biochemical and Biophysical Methods*, 61, 107-118 (2004)
6. Imrik K, Farkas E, Vasvári G, Szilágyi I, Sarzynski D, Dóbe S et al. (8): Laser spectrometry and kinetics of selected elementary reactions of the acetonyl radical, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 6, 3958-3968 (2004)
7. Fábián L, Kálmán A, Argay Gy, Bernáth G, Gyarmati ZsCs: Two polymorphs of a beta-lactam (trans-13-azabicyclo[10.2.0]tetradecan-14-one). Concomitant crystal polymorphism and isostucturality, *Chemical Communications*, 2114-2115 (2004)
8. Megyes T, Grósz T, Radnai T, Bakó I, Pálinkás G: Solvation of calcium ion in polar solvents: An X-ray diffraction and ab initio study, *Journal of Physical Chemistry A*, 108, 7261-7271 (2004)
9. Drahos L, Peltz Cs, Vékey K: Accuracy of enthalpy and entropy determination using the kinetic method: are we approaching a consensus? *Journal of Mass Spectrometry*, 39, 1016-1024 (2004)
10. Lagana A, Lendvay Gy (eds): *Theory of Chemical Reaction Dynamics*, Kluwer: Academic Publishers, Netherlands, 514 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Átlaglétszám ¹ :	84	Ebből kutató ² :	62
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			27
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			102
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			102
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	94	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	-
nemzetközi együttműködés keretében:	34	SCI által regisztrált folyóiratban:	92
összesített impakt faktor:	178,751	összes hivatkozás száma ⁴ :	1351
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1148
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	3
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	4	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	31	poszterek száma ⁶ :	44
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		381,723 MFt	
Beruházási támogatás:	- MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	-
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			20
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,181 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			13
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,351 MFt
Egyéb:	12	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	50,759 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			2
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,120 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,792 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,800 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			- MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Saját kutatás-fejlesztési munkával elkészítették egy *új típusú rézgőzlézer* laboratóriumi példányát, amit sikeresen alkalmaztak tájékozódó jellegű fotokémiai vizsgálatokban. A kifejlesztett lézerberendezést várhatóan alkalmazzák a gyakorlatban is. Jelentős érdeklődés mutatkozik iránta bőrgyógyászok és kozmetológusok részéről.

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2004. évi feladatait két alapvető kutatási irányba csoportosította:

- heterogén katalitikus folyamatok és katalizátoraik vizsgálata
- nukleáris kémiai kutatások, különös tekintettel gyakorlatban is alkalmazható módszerek fejlesztésére és alkalmazására.

A heterogén katalitikus és kapcsolódó anyagkutatások terén fő feladatok voltak: a nagy-aktivitású, nanoszerkezetű arany/fémoxid tartalmú, a kétfémes és grafit nanoszál katalizátor rendszerek fejlesztése és működésük felderítése, környezetvédelmi szempontból fontos katalitikus reakciók mechanizmusának vizsgálata. Az anyagszerkezeti kutatások terén a felületi és vékonyrétegek, rétegvegyületek és porózus anyagok szerkezete, nehézionos sugárzással előidézett szerkezetváltozások képezték a súlyponti feladatokat.

A nukleáris kémiai kutatások fő feladatai a Handbook of Prompt Gamma Activation Analysis (PGAA) c. monográfia elkészítésének befejezése, a módszer további fejlesztése és az in-beam Mössbauer spektroszkópia kiépítése voltak.

A sugárhatáskémiai kutatások fő feladata a polimerizációkinetika terén az iniciálás mechanizmus és az iniciáló gyök szerkezete közötti összefüggések tanulmányozása és funkcionális polimer monolitok előállítása volt. Másik fő irány volt az ipari szennyvizekben levő kémikáliák sugárzásos lebontása.

A kutatási tevékenység mellett az intézet végezte „háttértevékenység”-ét az Országos Atomenergia Hivatal (OAH) számára. E téren a sugárzó anyagok új nyilvántartási rendszerének bevezetése volt különösen jelentős feladat. A nukleáris ellenőrzési módszerek fejlesztése terén a paksi sérült fűtőelemek hasadóanyag tartalma meghatározási módszerének kidolgozása volt az egyik fő feladat.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Heterogén katalitikus folyamatok és katalizátorok kutatása (tisztá és célzott alapkutatás^{})*

Katalizátorkutatás, különös tekintettel a nano-szerkezetekre:

UPS, XPS, TEM és SIMS-ToF MS vizsgálatok eredményei bizonyították, hogy a vas-oxid vékonyréteg CO oxidációban mutatott katalitikus aktivitásának növekedése a felület *alatt* elhelyezkedő arany fém réteg, illetve Au nanorészecskék hatására következik be és nem az Au

^{*} A KF tevékenység minősítése a 2004. évi CXXXIV törvény 4 §-a alapján

felületre történő migrációjának következménye. Elektron kölcsönhatásra utal a nanorészecskék nagyobb promoteáló hatása. Hasonló hatás tapasztalható titán-dioxid esetében is.

0,6 Ti/Au arányú szilícium-oxid hordozós Au/Ti-oxid-hidroxid nanokompozitot állítottak elő, amelynek aktivitása eléri az azonos szemcseméretű Au/TiO₂ katalitikus aktivitását ugyanabban a reakcióban. Kimutatták a CeO₂ hordozós AuPd nanorészecskékben, továbbá a két fém közötti gyenge szinergikus hatást. Előnyösen befolyásolták gamma radiolízis útján készített, polimerrel stabilizált ezüst szólok katalitikus tulajdonságait arany leválasztása útján. Számos kísérlet történt inverz micellás kétfémes nanorészecskék készítésére és CO oxidációban mutatott aktivitásának vizsgálatára.

Hordozós Pt és Rh katalizátorok felületmódosítása során megállapították, hogy kisebb mennyiségű inaktív adalékok (Ge, Sn) meghatározott típusú aktív helyeket foglalnak el, nagyobb mennyiségben elegyfázist képeznek. Ugyancsak elegyfázis képződését állapították meg Pt-Pd és Pt-Rh mintáknál is.

Néhány nm átmérőjű Rh és Pt-szemcsés, grafit nanoszál hordozós, nagy stabilitású, oxidálással regenerálható katalizátorokat vizsgáltak és megállapították, hogy azok szelektivitása – a grafit nanoszálak hidrogéntároló képességének köszönhetően – előnyös a hexán vázátrendeződés szempontjából.

Módszert dolgoztak ki hordozós ezüst katalizátorok ezüst felületének szelektív meghatározására N₂O kemisorpcióval.

Fizikai módszerekkel (XRD, XPS, HRTM) bizonyították Pt és PtS egyidejű jelenlétét szulfidált állapotban hordozós platina katalizátoron, amely nem volt aktív a benzol, de aktívnek mutatkozott a ciklohexén hidrogénezésben, összhangban azzal az eredménnyel, amely szerint a redukált formában felületükön zérus vegyértékállapotú fémet tartalmazó MoO_x bázisú katalizátorok, valamint a hordozós monometallikus Co, Ni, Pd és Pt szulfidált állapotban is jól hidrogénezik a ciklohexént, de egyáltalán nem katalizálják a benzol/ciklohexán hidro-dehidrogénezést, ami e két folyamat eltérő mechanizmusára utal.

Ráfördítés: 18 fő [10 fő intézeti], 90 MFt állami KV és 5,5 MFt pályázati forrás.

Reakciómechanizmus vizsgálatok:

CO preferenciális oxidációja H₂ jelenlétében (PROX-reakció, amely mind környezetvédelmi, mind alapanyag-átalakítási szempontból nagy perspektívájú folyamat): Különböző arányú cirkónium- és cérium-oxidot tartalmazó hordozós Pt katalizátoron négy lehetséges mechanizmust mutattak ki, ezek közül a fém-fémoxid határfelületen a CO-oxidáció nagy szelektivitással Langmuir-Hinshelwood mechanizmus szerint fut le.

Megállapították, hogy a H-ZSM-5 hordozós MoGa katalizátoron adszorbeált metán N₂O jelenlétében CO₂-vé, etánná és etilénné alakul. A reakcióban már szobahőmérsékleten N₂O hatására Mo⁶⁺ és Mo⁴⁺ centrumok keletkeznek. Azonosították a Ga által generált oxidációs centrumokat.

Ráfördítés: 5 fő [4 fő intézeti], 15 MFt állami KV, 2MFt pályázati forrás.

Tömbi szerkezetvizsgálatok:

Nehéz ionokkal (⁸⁴Kr, ²⁰³Bi) végzett besugárzás során Ti és Hf-foszfát szerkezetének változatlan állapotban maradását és vezetőképességük változatlanságát állapították meg. In situ Mössbauer spektroszkópiás és XRD vizsgálatokkal nyomon követték az Fe-MFI templát impregnálásos szintézisének részlépéseit. Megállapították, hogy a lokális kristályosodás a

szintézis első szakaszában megindul, a röntgen diffrakcióval kimutatható kristályos fázis kialakulása azonban hosszabb időt igényelt.

Összességében: az e témakörökben előirányzott feladatok nagy része teljesült.

Ráfordítás: 4 fő [2 fő intézeti] 3 MFt állami KV.

Nukleáris kémiai kutatások (tisztá és célzott alapkutatás és kísérleti fejlesztés)

Kimutatták a radiatív erősségfüggvény nagymértékű növekedését az alacsony energiájú kvázi-kontinuumban lejátszódó γ -átmenetek során.

Új PGAA alkalmazások:

A módszer alkalmazhatóságát kiterjesztették további, nukleáris anyagtudományi, geológiai és régészeti (archeometriai) feladatok megoldására. A PGAA mérés technikát fejlesztették, részben EU FP6 támogatással: újabb eljárásokat (pl. Nyalábszaggató mérés) standardizáltak, az időben változó gamma-intenzitások mérés technikáját tökéletesítették. A módszer további fejlesztésének alapját képezi a *Handbook of Prompt Gamma Activation Analysis with Neutron Beams* c. monográfia véglegesítése és megjelentetése. A módszer kidolgozásában, fejlesztésében és sokirányú alkalmazási eljárások kifejlesztésében az intézet munkatársai kiemelkedő, világszerte elismert szerepet játszottak.

Nukleáris PGAA alkalmazások:

Meghatározták a transzmutációs berendezések fő szerkezeti anyagát és a $^{204, 206, \text{NAT}}\text{Pb}$ neutronbefogási hatáskeresztmetszetét. Módszert dolgoztak ki neutron befogásos γ - γ koincidencia mérésre, valamint ^{209}Bi hatáskeresztmetszet meghatározására. Megállapították, illetve pontosították több neutronbefogási és n, γ reakcióval kiváltott gamma átmenet energiáját.

Az eredmények többirányú gyakorlati hasznosítása lehetséges: a nukleáris hulladékok átalakításos feldolgozása, különböző további módszerek kifejlesztése útján. A kutatások részben EU FP6 és EU3RC- támogatással, részben az OAH-val kötött KF szerződés keretében, továbbá kiterjedt nemzetközi együttműködés keretében folynak [belga (Geel), francia (Cadache, Saclay, Grenoble) intézetekkel].

Ráfordítás: 3 hazai kutató, 2 hazai PhDs, 4 külföldi kutató és 1 külföldi PhD-s. Állami KV: 16 MFt, pályázati forrás 8 MFt.

Analitikai alkalmazások:

Kompozit kerámiák, szén nanocsövek és TL doziméterek szennyezettségét, halogénlámpákban alkalmazott fémhalogenidek összetételét, tórium tartalmát határozták meg. (Együttműködés: MTA MFA, IKI, General Electric Bp.)

Geológiai alkalmazások:

A Bodai Aleurolit formációból származó fűrómag-mintákban (kiégett fűtőelemek végleges elhelyezésével kapcsolatos vizsgálatokhoz), a Balaton-felvidék vulkanitjaiban és a Persány hegység felsőkéreg xenolitjaiban meghatározták az elemi összetételt.

Archeometriai alkalmazások:

Különböző földrészekben az ókorban, illetve a középkorban művi úton készített anyagok (pl. venezuelai kerámiák, középkori és barokk üvegek) összetételét határozták meg, továbbá

anyagösszetétel alapján i.e. első és második évezredi vastechnológiai és I-V. sz. vaskohászati eljárásokat azonosítottak széleskörű hazai (MNM) és nemzetközi (Tübingeni E. Bolivar E., Nukl. Kém. és Techn. Int. Krakko) együttműködésben, részben EU FP 6 keretében.

Az előirányzott kutatási-fejlesztési feladatok messzemenően teljesültek. Az *in beam* Mössbauer mérőberendezés üzembehelyezése a beszerzések elhúzódása miatt még nem történt meg.

Ráfordítás: 5 kutató [3 hazai], 1 hazai PhD-s, 2 külföldi kutató, illetve állami KV-ből 11 MFt, pályázati forrásból 18 MFt.

Sugárbiztonsági kutatások (célzott alapkutatás és kísérleti fejlesztés)

Ellenőrző módszerek fejlesztése:

Roncsolásmentes módszert dolgoztak ki uránminták korának (azaz a dúsítás, illetve reprocesszálás óta eltelt időszak) a gamma spektrum – a $^{214}\text{B}/^{234}\text{U}$ aktivitás arányán alapuló – meghatározására. PGAA eljárást dolgoztak ki ólomkonténerben elhelyezett, sugárforrással maszkírozott urán kimutatására. Ezek az eredmények a nukleáris anyagok illegális forgalmának felderítésére alkalmazhatók. A PuBe tartalmú források hasadóanyag tartalmának meghatározására az intézet által kidolgozott módszert kiterjesztették más, transzurán tartalmú neutron-forrásokra. Ez hozzájárul a nyilvántartási és ellenőrzési kötelezettségek pontosabb teljesítéséhez.

Ráfordítás: 5 intézeti kutató, 25 MFt állami KV, 30 MFt pályázati forrás.

Sugárdozimetria:

Új eljárást dolgoztak ki nagyenergiájú ipari gyorsítók elektronenergiájának mérésére. A „Sunna” dozimétert optikai abszorpció, illetve optikailag gerjesztett lumineszcencia mérésére alkalmassá tették, ami lehetővé teszi használatát dózisenőrző rutin módszerként nagy aktivitású γ - és nagy energiájú elektron-besugárzó berendezésekben. Különböző sugár-iniciált jelenségek (optikai és termolumineszcencia, vezetőképesség, optikai abszorpció) paraméter változásai és a dózis nagysága közötti korrelációt határoztak meg, így a dózis mérésére elvben alkalmazható anyagokat rutinmérésekre alkalmassá tették. Ezzel tovább növelték a különböző feladatokra alkalmas dózismérők választékát.

Ráfordítás: 3 intézeti kutató, 35 MFt állami KV, 4 MFt pályázati forrás.

Részvétel a PA RT-ben 2003-ban bekövetkezett üzemzavar következményeinek felszámolására irányuló előkészületekben:

Kidolgozták a sérült, újratokozott fűtőelem-maradványok hasadóanyag tartalmának γ -spekrometriás meghatározási módszerét. Számításos becslést végeztek a tokokban sugárzás által iniciált gázkiválás mértékére. Konzultációkat folytattak a kivált gázok katalitikus hatástalanításának lehetőségéről és véleményezték az orosz partner erre vonatkozó ajánlatát.

Ráfordítás: 3 intézeti kutató, 4 MFt állami KV, 6 MFt szerződéses forrás.

A nagyaktivitású atomerőművi hulladékok végleges elhelyezését célzó kutatások részeként, kidolgozták radioizotópok közetmintákban történő migrációjának méréséhez alkalmazható metodikát. Elemző tanulmány készült e hulladékok elhelyezésének környezetvédelmi problémáiról, spallációs átalakítási és hasznosítási lehetőségeiről.

Az előirányzott fő feladatok alapvetően teljesültek.

Sugárhatáskémiai kutatások

A polimerizációkinetika terén:

Az izo-propil gyök reakcióit tanulmányozták maleát, fumarát, akrilsav-, illetve metakrilsav észter típusú vegyülettel, impulzus-radiolízis technikával. Megállapították, hogy a gyök addicionálódik a kettős kötésre, vagy elektronátadás útján reagál. A polimerizáció témakörben készült akadémiai doktori értekezést 2004 novemberében, a PhD tézist 2005 januárjában sikerrel védték meg.

Ráfördítés: 2 intézeti kutató, 16 MFt állami KV, 2 MFt pályázati forrás.

Az ipari szennyvizek sugárzásos ártalmatlanítása:

Tisztázták az Apollofix red színezék híg, vizes oldatban lejátszódó sugárzásos degradációjának mechanizmusát: a hidratált elektron az azo-csoport támadásával megszünteti a kiterjedt konjugációt, ezért jó hatásfokkal színtelenít, míg a hidroxil gyök rossz hatásfokú, mert a telítetlen kötésekkel támadja, a reakcióban keletkező gyökök nagy része visszaalakul kiinduló vegyületté.

Ráfördítés: 2 intézeti kutató, 21 MFt állami KV, 3 MFt pályázati forrás.

Különleges tulajdonságú polimerek sugárzásos előállítására:

Újabb, gyógyszerek adagolására alkalmas géleket szintetizáltak polimerek sugárzásos térháló-sításával. Kromatográfias proteintisztításra és elválasztásra alkalmazható funkcionális polimer monolitokat állítottak elő és meghatározták az adott elválasztási feladathoz rendelhető optimális előállítási körülményeket. Kísérletileg bizonyították e monolitok alkalmasságát HPLC kolonna töltetként proteinek és nukleinsavak szétválasztására.

Ráfördítés: 2 intézeti kutató, 16 MFt állami KV, 0,8 MFt pályázati forrás.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az IKI munkatársai által 2004-ben megjelentetett tudományos dolgozatok társszerzőinek 20 %-a más hazai, további 50 %-a külföldi intézmény munkatársa.

Az intézet részvételét a felsőoktatásban - főleg a BME-n és a Veszprémi Egyetemen - oktatók száma és az intézeti PhD hallgatók száma jellemzi. Előadások tartása mellett említendő a radiokémiai oktatás lehetőségét biztosító tevékenység (előadás és laboratóriumi gyakorlatok vezetése) BME és ELTE hallgatók részére.

A katalíziskutatás terén a fő hazai együttműködő partnerek a SzTE több (Kolloidkémiai, Szerves Kémiai, Alkalmazott és Környezetkémiai) tanszéke, az ELTE Magkémiai Tsz., az MTA MFA, RMKI és a KK egyes intézetei. Nemzetközi (kétoldalú) együttműködésben partnerek a CNR (Nanostrukturális Anyagtud. I.), a Svéd TA Kém. Techn. I., a LACCO CNRS Katalízis és Petrolkémiai I. CSIC, és a Fritz Haber I. (Berlin). Nemzetközi együttműködés többek között az Au, AuPd nanoszerkezetű katalizátorok előállítására és jellemzésére, a CO-oxidációra a PROX reakcióra, az előállított katalizátorok közös kémiai és fizikai vizsgálatára irányul, nagy teljesítményű fizikai berendezések (XRD, XPS, EMR stb.) igénybevételét teszi lehetővé.

A nukleáris kémiai kutatások terén a hazai együttműködő partnerek: MTA KFKI AEKI, ATOMKI és MFA, Magyar Nemzeti Múzeum, ELTE Közettan-Geokémiai Tsz. A nemzetközi együttműködés 14 intézményre terjed ki, melyek közül külön említendők a szakterület élvonalában lévő NIST (Washington DC), a Lawrence Berkeley Nat. L., I. Laue Langevin (Grenoble), JINR (Dubna). A vezető nukleáris intézetekkel a módszerhez kapcsolódó célzott alapkutatások és alkalmazott kutatások számos egyetemi tanszékkal, a módszer fejlesztésére és új alkalmazási lehetőségek feltárására irányuló fejlesztő kutatás, továbbá tiszta alapkutatások (archeometriai) terén van együttműködés.

A nukleáris kémiai és sugárbiztonsági, valamint sugárhatáskémiai kutatás és fejlesztések terén az IKI a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (NAÜ) több projektjében vesz részt, a PGAA kutatások több EU programnak is részét képezik.

Kutatási fejlesztési megállapodások alapján az intézet nukleáris biztonsági kérdésekben elsősorban az OAH-val működik együtt, továbbá a PA RT-vel és az Agroster besugárzó vállalattal.

A nukleáris biztonsági (rutin) tevékenység keretében az IKI együttműködik az OAH mellett az ÁNTSZ és a Belügyminisztérium illetékes szervezeteivel, valamint a sugárzó anyagok szállításában és használatában érdekelt intézményekkel és vállalatokkal. Az intézet 18 külföldi partnerrel, közöttük nemzetközi szervezetekkel, illetve munkacsoporttal folytat együttműködést, mint például az Internat. Techn. Group for Combatting Illicit Trafficking of Nuclear Materials.

A sugárhatáskémiai kutatás terén öt hazai felsőoktatási intézménnyel és hét külföldi partnerrel (akadémiaközi, illetve TÉT keretben), valamint a NAÜ-vel működik folyamatosan együtt az intézet. Az együttműködést nagyban segítette, hogy az év folyamán 13 MTA kétoldalú egyezményes és 3 TÉT utazás valósult meg. Példaként említendő a CNR Bologna-i intézetével a sugárzásos polimerizáció terén az együttműködés. A vizsgálatokat részben az intézeti mérőegyhüttessel, részben MTA-CNR, illetve Bolognában, a nagyobb időfelbontású impulzusradiolízis berendezéssel végezték.

Ketten töltenek be nemzetközi szakfolyóiratban (Applied Catalysis A, illetve Radiation Physics and Chemistry) területi, illetve szakterületi szerkesztői tisztséget.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézetben folyó nanokatalízis kutatások mind hazai (OTKA), mind nemzetközi (COST) forrásokból részesültek.

Kiemelkedő fontosságúak és eredményesek a nanorészecskéket tartalmazó modell katalizátorok kidolgozására, felületi tulajdonságaik és aktivitásuk vizsgálatára, valamint az arany alapú katalizátorok előállítására és jellemzésére, két COST és egy OTKA program keretében végzett kutatások. OTKA források is támogatják a nemzetközi együttműködésben folyó PROX- kinetika és a kétfémes katalizátorok szerkezeti, felületi és katalitikus tulajdonságai terén végzett, jelentős eredményeket hozó kutatásokat Az EU-6 Coordination of Nanostructured Catalytic Oxides Research and Development in EUROPE (CONCORDE) – programjában is részt vesznek.

A PGAA kutatás-fejlesztés széleskörű nemzetközi elismertségét mutatja az IKI-nek az EU FP6 program NM13 témája keretében játszott szerepe és az összességében nem nagy, de

széleskörű nemzetközi ismertséget és együttműködési lehetőséget biztosító, rendszeresen elnyert több NAŰ pályázat. Több sugárhatáskémiai OTKA-forrás, két NAŰ projekt keretében végzett célzott alap kutatás és kísérleti fejlesztés bizonyítja a tevékenység elismert voltát. A proteinek elválasztására és tisztítására használható gélek és pórusos polimerek előállítását és vizsgálatát célzó projekt célkitűzései teljesültek. A sugárzásos szennyvízkezelés keretében az előzőekben már ismertetett eredmények és projekt összejavitelek résztvevőinek - beleértve a NAŰ apparátus illetékeseit – véleménye, hogy a kutatás-fejlesztés eredményesen folyik.

Perspektivikus jelentősége miatt kiemelés érdemel a közelmúltban elnyert, Funkcionalizált határfelületek fejlesztése és alkalmazása specifikus biokémia és kémiai rendszerekben című, 10 résztvevőből álló konzorcium keretében induló NKTH projekt, melynek az IKI a koordinátora (NKFP 3A058-04, 211 M Ft). A projektben az Izotóp Intézet Kft is részt vesz. Ugyancsak kiemelhető, hogy az intézet részt vesz a FUNMIG EU-6 Integrated Project-ben, amely a radioizotópok migrációjának alapfolyamatait vizsgálja (a nagyaktivitású atomerőművi hulladékok végleges elhelyezése szempontjából fontos, 51 résztvevő, 8 M Euro. A projekt keretében az IKI munkatársai anionos specicszek képzésére hajlamos radioizotópok migrációját vizsgálják.

Összességében: az intézeti kutatások pályázati támogatottságában a hazai elismerés elmarad a külföldihez képest. A kutatások hazai támogatása főleg az OTKA és az OAH részéről történik, a többi hazai pályázati forrás részéről a hazai megítélés messze elmarad a nemzetközitől. Ez talán az IKI sajátos működési profiljának, esetleg sajátos szervezeti helyzetének következménye.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Guczi L, Pető G, Beck A, Pászt Z: Modeling transition metal nanoparticles: The role of size reduction in electronic structure and catalysis, *Topics in Catalysis*, 29, 129-138 (2004)
2. Baker RT, Rodriguez N, Mastalir A, Wild U, Schlogl R, Wootsch A, Paál Z: Platinum/graphite nanofiber catalysts of various structure: Characterization and catalytic properties, *J. Phys. Chem. B.*, 108, 14348-14355 (2004)
3. Voinov A, Algin E, Agvaanluvsan U, Belgya T, Chankova R, Guttormsen M, Mitchell GE, Rekstad J, Schiller A, Siem S: Large Enhancement of Radiative Strength for Soft Transitions in the Quasicontinuum, *Phys. Review Letters*, 93, 42504 (2004)
4. Bagi J, Nguyen TC, Lakosi L: Assessment of the Pu content of Bu-Be neutron sources, *Nucl. Instruments and Methods in Physics Research B*, 222, 242-248 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Izotópkutató Intézet

Átlaglétszám ¹ :	88	Ebből kutató ² :	39
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			14
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			55
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			51
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	34	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	3
nemzetközi együttműködés keretében:	23	SCI által regisztrált folyóiratban:	38
összesített impakt faktor:	31,6	összes hivatkozás száma ⁴ :	553
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			456
Megjelent könyv:	1	könyvfejezet:	15
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	47	poszterek száma ⁶ :	35
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		372,479 MFt	
Beruházási támogatás:	7,913 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	1
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			8
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,870 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			13
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,550 MFt
Egyéb:	12	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	24,784 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			10
EU forrásból:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7,428 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3,365 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			5
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,541 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			- MFt

KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, XII. Konkoly-Thege út 15-17.
Telefon: 391-9322, Fax: 275-4668,
e-mail: balazs@konkoly.hu, honlap: www.konkoly.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A beszámolási időszakban az intézet az alábbi témakörökben folytatott eredményes kutatómunkát:

- *A csillagok belső szerkezete és fejlődése*
- *Aktív jelenségek csillagok légkörében*
- *Napaktivitás*
- *Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája*
- *A felsőlégkör szerkezete*
- *Kisebb témák, interdiszciplináris kutatások*

Az elért eredmények az alapkutatások körébe tartoznak, ezért hozzájuk közvetlen gazdasági haszon nem rendelhető.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Csillagok belső szerkezete és fejlődése (11 kutató, 4 OTKA, 1 Tét, 1 MŰI pályázat)

RR Lyrae változók: Az M3 gömbhalmaz RR Lyrae változóinak vizsgálata során 5 újabb változót fedeztek fel (2 RRab, 2 RRc és 1 SX Phe típusút), amelyeknek néhány fontos paraméterét is meghatározták. Ezzel a halmazban az általuk felfedezett változók száma 13-ra nőtt. A halmazban eddig ismert 8 kétmódusú (RRd) változó számát is sikerült egy új felfedezésével 9-re növelniük. Az összes korábbi fotometriai anyagot (fotografikus ill. CCD) megvizsgálva megmutatták, hogy az M3-ban az RRd csillagok módusainak arányai az 1900-as évek eleje óta stabil. Egyetlen kivétel a V79, amely az 1970-es években vált RRd csillaggá. A korábban V adatokban kimutatott különböző fejlődési állapotú csoportokat a B és I színekben is sikerült elkülöníteniük. A halmaz szín-fényesség diagramjainak segítségével 4 olyan csillagot sikerült azonosítaniuk, amelyek az instabilitási sávba esnek, mégsem mutatnak mérhető fényességváltozást.

Kimutatták, hogy az RR Gem az eddig ismert legrövidebb periódussal (7,2 nap) és legkisebb amplitúdóval (0,05mag) rendkívül szabályos modulációt mutat, ami a fénygörbe felszállóág körüli, alig több mint 0,2 fázisára koncentrálódik. A kis amplitúdójú állapotban az RR Gem átlagosan $\approx 30-40$ K-val hidegebb, mint a nagy amplitúdójú fázisban. Ez az első ilyen részletes analízisre alkalmas kiterjedt fotometria Blazhko változóról.

A V823 Cas 3-módusú pulzáló változó 2003-as őszi méréseinek értelmezése során nem kaptak a csillag fizikai paramétereire a pulzációs és fejlődési modellekre egyszerre teljesülő megoldást. Ebből, és a csillag módusainak periódus és amplitúdó változásából arra a következtetésre jutottak, hogy a V823 Cas valószínűleg egy rendkívül gyors átmeneti állapotban van.

A CZ Lac 2004 őszi mérései alapján kimutatták, hogy fényváltozása 2 különböző periódusú modulációval írható le (≈ 14 ill. 18 nap). Ezek közül az egyik RR Gem szerű rendkívül szabályos amplitúdómoduláció, a másik az RR Lyrae viselkedéséhez hasonló, mind amplitúdó, mind fázismoduláció. Ennek az eredménynek az értelmezése a jelenlegi modellek keretében nehezen képzelhető el.

δ Cephei csillagok: Kimutatták, hogy az MY Puppis 5,7 napos pulzációs periódusú cefeida spektroszkópiái kettős egyik komponense. Ezt igazolja az újabb spektrumok alapján meghatározott átlagos radiális sebesség is. Kimutatták továbbá a Tejútrendszerben ismert egyetlen anomális cefeida, az XZ Ceti pulzációs periódusának növekedését. A periódusváltozásnak a pulzációs modellekkel való összevetése a periódus 2005-ös értékének ismeretében történik majd.

Folytatták a klasszikus instabilitási sáv többmódusú, radiális pulzációt mutató csillagaival kapcsolatos vizsgálataikat. Az anomális cefeidákat tanulmányozták abból a szempontból, hogy elméletileg előfordulhat-e kétmódusú pulzáció közöttük. Részletes modellszámítást végeztek az NIIF szuperszámítógépe segítségével. Megállapították, hogy az alaplómódusban és első felhangban is rezgő anomális cefeida modellek szinte az egész paramétertartományban megtalálhatóak a tisztán alaplómódusban és az első felhangban pulzáló modellek között. Csillagfejlődési és pulzációelméleti szempontból nagy jelentősége van ilyen csillagok vizsgálatának.

δ Scuti csillagok: átfogó vizsgálatot készítettek 30 jól vizsgált δ Scuti csillag frekvenciája és amplitúdója felhasználásával. A teljes minta alapján a domináns módusok egy szűk frekvencia tartományban koncentrálódnak az egyedi csillagok különböző fizikai paramétereitől függetlenül. A θ Tuc és az XX Pyx általánostól eltérő, nagyobb amplitúdóit a kettős rendszerben a domináns pulzációs módus és a pályaperiódus között jelentkező rezonancia effektus okozza.

A nagyamplitúdójú δ Scuti csillagok: közül- az SZ Lyn O-C értékeiből levezetett kettős-csillag modellje megerősítette korábbi eredményeiket, míg a BS Aqr és AD CMi esetében lényegesen hosszabb pályaperiódusokat kaptak az eddig sejtett és publikált adatoknál.

β Cephei csillagok: Részt vettek a v Eridani nemzetközi kampányában, amely során 11 távcsőről 148 derült éjszaka során több mint 600 órás fotometriai adatot sikerült gyűjteni. Meghatároztak 23 szinuszos komponenst, amelyből 8 független gerjesztett módus, míg a többi kombinációs frekvencia. A triplettek rotációs felhasadásként történő értelmezése 30-60 óra közötti rotációs periódust sejtet. A 0,432 ciklus/napos alacsony frekvencia valószínűleg annak a jele, hogy a v Eri mind β Cephei típusú, mind lassan pulzáló B (SPB) csillag.

Mira típusú változócsillagok: Az ISO Data Archive-ből kigyűjtötték az R Sculptoris nevű Mira-csillagról az ISOPHOT nevű műszerrel végzett egyes megfigyeléseket, és megállapították, hogy az R Scl 60 mikrométeren is változócsillag, maximumban a csillag ezen a hullámhosszon kb. 2x fényesebb, mint minimumban. A távoli infravörös fényességváltozás üteme korrelációt mutat az optikai tartományban megfigyelt fényességváltozással.

Változócsillagok fotometriája nyílthalmazokban: A piszkétetői távcsövekkel végzett megfigyelések révén az NGC~457 és IC~1311 nyílthalmazokban új változócsillagokat találtak, melyek túlnyomó többsége kis amplitúdójú pulzáló változóknak tűnik.

Részt vettek egy nemzetközi megfigyelési kampányban, melynek célpontja az M67 nyílthalmaz volt. A kampány célja a halmazban található vörös óriás csillagok aszteroseizmológiai vizsgálata volt, elsősorban naptípusú oszcillációk kimutatása.

Szoftverfejlesztés: Az év folyamán továbbfejlesztették az intézetben általában használt MuFrAn programcsomagot, amely idősorok frekvenciaanalízisét végezte el. A fejlesztéssel két célt érték el. A programcsomagot egy új, könnyen kezelhető Tcl/Tk alapú grafikus felhasználói felülettel látták el (ennek köszönhetően a program Linuxos PC-ken is futtathatóvá vált), továbbá kifejlesztettek egy script-nyelvet, mely a felhasználó számára lehetővé teszi a nagy mennyiségű adatsor automatikus, de ennek ellenére rugalmas és ellenőrizhető feldolgozását.

Nagy látómezőben található változó objektumokon végzett tömeges fotometria mérések kiértékelésére egy módszert dolgoztak ki, amely felhasználja azt a tényt, hogy bizonyos effektusok egyszerre több csillagot is befolyásolnak. Ennek megfelelően egy több száz (~ezer) csillag fénygörbéjéből álló ún. minta-halmaz segítségével a legkisebb négyzetek módszere alkalmazásával illesztették a szűrni kívánt fénygörbét. Így minden olyan változást kiszűrhetek, amely a vizsgált objektumban és a minta-halmazban közös.

Az idő-frekvencia analízist finomító reassignment módszer segítségével továbbfejlesztették a TIFRAN szoftver-csomagot.

Aktív jelenségek csillagok légkörében (5 kutató, 2 OTKA, 2 Tét pályázat)

Meghatározták a kettős rendszerben lévő ζ And óriáscsillag alapparamétereit irodalmi adatok, valamint saját spektroszkópiai eredményeik alapján. A csillag és a kettős rendszer paramétereinek minél pontosabb ismerete rendkívül fontos, mivel a csillag igen gyorsan forog és emiatt lapult, emellett kettős is, ami a csillag alakjának a gömbtől való jelentős eltérését okozza. A csillag torzulását, mely a fényességben egy kettős minimumot okoz, figyelembe kell venni mind a fotometriai, mind a spektroszkópiai adatok modellezésénél. A rendelkezésre álló adatokból sikerült konzisztens képet kapni a csillagról. Ennek ismeretében a fotometriai adatok korrigálhatók lettek a torzulás okozta fényváltozásra. A maradék fényváltozás modellezését elvégezték, és megállapították, hogy az aktivitás a csillag másik komponense irányában és azzal ellentétes oldalon található, ez az óriás aktív csillagokon sokszor előforduló jelenség.

A beszámolási időszakban is folytatták az SV Cam-ra vonatkozó megfigyelési adatok gyűjtését. Folt paramétereket határoztak meg 1993-as és 1994-es fénygörbékre. A szoros kettős rendszerek fizikai paramétereit és fejlődését jelentősen befolyásolhatja harmadik test jelenléte a rendszerben. Az SV Cam esetében ez már korábban is felvetődött. Részben még publikálatlan új méréseket vontak be az analízisbe, amellett, hogy figyelembe vették a mások által korábban publikált és feldolgozott adatokat is. Ezáltal új, pontosabb becslést adhattak a feltételezett harmadik test paramétereire és pályájára.

A V861 Her - W UMa típusú - fedési változóra vonatkozó Cousins V(RI)_C fénygörbéket analizálták. Tanulmányozták a rendszerben jelentkező O'Connell effektust, és foltparamétereket határoztak meg. Kimutatták az egyik komponens megnövekedett kromoszférikus aktivitását.

Tanulmányozták öt W UMa-rendszer periódusváltozásait (AB And, OO Aql, DK Cyg, U Peg, V566 Oph). Eredményeik szerint az A színképosztályú DK Cyg-nél csak a tömegátadásra utaló periódusváltozás figyelhető meg, a többi, F, G színképosztályú rendszereknél a

szekuláris periódusváltozáson kívül évtizedes időskálájú periódusváltozás is tapasztalható. Ez utóbbit mágneses aktivitási ciklusként lehet értelmezni. A talált változások ezért indirekt módon arra utalnak, hogy valahol F0 környékén van egy elválasztó vonal a W UMa rendszereknél, aminél korábbi rendszerek esetében nem figyelhetünk meg mágneses aktivitást, a későbbieknél viszont igen.

Folytatták a V861 Herculis W UMa-típusú, rendszer VRI sávokbeli észlelését. A rendszerben nagyon erős és rendkívül gyors - napos és éves időskálán is változó nagyságú és helyzetű – csillagfoltok okozta fénygörbe változások figyelhetők meg.

Periódusváltozások tanulmányozása céljából észlelték a GZ Andromedae, DK Cygni, AK Herculis, AU Serpentis W UMa-csillagok minimumait. Az észlelésekből meghatározott minimumidőpontokat a szakirodalomban közölték.

Newton-XMM UV és röntgen adatok felhasználásával vizsgálták öt dMe típusú flercsillagot. 60 óra észlelési idő során 20 csillagfoltot találtak. Elsőként sikerült kimutatniuk korrelációt csillagfoltok UV és röntgen fluxusa között.

Napaktivitás (9 kutató, 2 OTKA, 1 ESA PECS pályázat)

SOHO/EIT sorozatfelvételeken hullámszerű jelenséget vizsgálva kimutatták, hogy nem MHD hullámról, hanem csomókba tömörülő hűvös anyagnak a koronából való leáramlásáról van szó. SOHO/SUMER adatok felhasználásával egy koronalyuk határa mentén kétirányú jeteket fedeztek fel, amelyek mágneses átkötődés helyéről kiáramló gázcsóváknek tulajdoníthatók.

Yohkoh/SXT, SOHO/MDI, SOHO/EIT, TRACE valamint WIND bolygóközi mágneses adatok felhasználásával úttörő munkát végeztek a mágneses helicitás (csavarodottság) észlelésekből való meghatározására a koronában és a CME-k során kidobott mágneses felhőkben. Két esetben meghatározva mind a koronában észlelt helicitás csökkenést, mind a mágneses felhő helicitását, jó egyezést kaptak e két érték között.

A NOAA 9373 aktív vidékben az új mágneses tér felbukkanását és a koronába való behatolását vizsgálták a TRACE műhold FeX ion 195 Å hullámhosszúságú színképvonalában készült felvételei segítségével. Az aktív vidék vizsgálata alapján sikerült bizonyítékot találni mágneses fluxus-csővek egymást keresztező felbukkanására, valamint kidolgozni egy általános képet a napfoltcsoportok és a napfoltok fejlődéséről.

Yohkoh/HXT kemény röntgen adatok és a SOHO/MDI mágneses méréseinek felhasználásával 32 flerben vizsgálták a talppontokban észlelt kemény röntgensugárzás intenzitását, amelyet összevetettek az ott észlelt mágneses térerősséggel. Korábbi észlelésekkel ellentétben kimutatták, hogy a kemény röntgensugárzást keltő elektronoknak egy konvergáló mágneses geometriában való csapdába esése, amely elméletileg várható, csak a megfigyelt esetek kétharmadában jött létre.

Egy CME fejlődését követték a korona alsó rétegeitől 1,5 napsugárig SOHO/MDI mágneses, TRACE EUV, RHESSI röntgen, SOHO/CDS spektroszkópiái és SOHO/ LASCO koronográf adatok felhasználásával. Kimutatták, hogy a CME egy csavarodott fluxuscső (helikus mozgást mutató filament) felemelkedésével indul, amely az impulzív energia felszabadulás (fler) megindulásakor felgyorsul (az indulási sebesség 1,6-szorosára), majd egy újabb gyorsulási fázison megy át, mielőtt elérné a koronográf látómezejét a felszíntől 1,5 napsugár távolságban.

A DPD-re alapozva vizsgálatokat indítottak arra vonatkozóan, hogy a Nap rotációjának ún. torziós oszcillációja és a napfoltok egyes paraméterei milyen térbeli korrelációkat mutatnak. Az első eredmények szerint a foltoknak a retrográd sávok nyírási zónához közeli tartományaival lehetséges a kapcsolatuk.

Napfoltok forgásának vizsgálatára egy automatizált módszert dolgoztak ki, amelyet SOHO/MDI adatokra alkalmaztak. A megvizsgált három forgó napfoltból két esetben megfigyelték a forgás irányának megváltozását, amely MHD torziós oszcillációk jelenlétére utalhat.

Megvizsgálták a foltok előfordulási gyakoriságának kelet-nyugat irányú aszimmetriáját a foltméret és a centrálmeridiántól mért távolság függvényében. Megállapították, hogy a 20-nál kisebb területű foltok nagyobb számban fordulnak elő az E75-85 sávban, mint a W75-85 sávban, és az aszimmetria iránya független a napfoltciklus fázisától. A többi esetben viszont nincs kimutatható aszimmetria.

Folytatták a MnI 539,47 nm spektrumvonal tanulmányozását részben debreceni észlelésekre alapozva. A vonal viselkedése igen érdekes, aktivitásfüggést mutat, nem kromoszférikus eredetű, hanem fotoszférikus. A vonal ekvivalens szélessége, félértékszélessége és mélysége megnő a foltokban és a félértékszélesség kivételével csökken a kromoszférikus fáklyákban.

Egy CME-t követtek a Naptól a Földig. A halo CME 2004 január 20-án volt megfigyelhető a SOHO és TRACE műszereivel, míg a WIND űrállomás és a CLUSTER szondák műszerei január 22-én észlelték egy bolygóközi lökeshullám áthaladását. A különböző pozícióban levő CLUSTER szondák által megfigyelt időkülönbségekből meghatározták a bolygóközi lökeshullám térbeli geometriáját, amely jó egyezést mutatott az aktív vidék helyzetével a Napon, amely a CME kiindulópontja volt.

Tovább vizsgálták a geoeffektív CME-k mágneses terének dipólciklustól függő észak-déli aszimmetriáját. Megállapították, hogy a lehetséges magyarázatot a következők között kell keresni: a helioszféra nagyléptékű észak-déli aszimmetriája, a különbözőfajta CME-k előfordulási gyakoriságának változása, vagy a mágneses felhő axiális tere domináns irányának dipólciklustól függő változása.

Az IMF B_y komponense kelet-nyugati aszimmetriát okoz a földi magnetoszférába történő energiabetáplálásban. Kimutatták, hogy ez az aszimmetria dipólciklus függő az ICME-k esetén. Antiparallel években fél évig az egyik irányú B_y dominál, és határozott K-NY aszimmetriát okoz. Parallel években a B_y két iránya kb. egyenlő gyakorisággal fordul elő egész évben, ezért az energiabetáplálás a poláris magnetoszférába szimmetrikus.

Megjelentették a „Debrecen Photoheliographic Data” napfoltkatalógust az 1993-1995 évekre nyomtatott formában CD melléklettel a HTML prezentációval együtt. Az 1998-ra vonatkozó előzetes adatokat ftp-re tették. Az 1989-es évre vonatkozó katalógusból 3 hónapnyi anyag készült el végleges formában, a többi előzetes formában használható.

Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája (6 kutató, 2 OTKA, 1 ESA PRODEX, 1 ESA PECS pályázat)

A kezdetétől követték a V1647 Ori kis tömegű fiatal csillag kitörését és az általa megvilágított McNeil-köd szerkezetét és fejlődését. Meghatározták a kúp alakú köd tengelyének inklinációját. Noha a csillag fényessége lassan csökken, egy évvel a kitörés kezdete után még több, mint 4 magnitúdóval fényesebb, mint kitörés előtt volt. A köd közeli infravörös (JHK) képein azonosították a csillagot körülvevő mintegy 6000 AU átmérőjű

cirkumsztelláris burkot. Optikai spektrumok sorozata azt mutatja, hogy a H α emisszió intenzitása alig változott a kitörés egy éve alatt. A piszkéstetői RCC teleszkóppal készült mély (4800s expozíciós idejű) H α képen azonosították a csillag környékén az összes ismert Herbig-Haro-objektumot, és a köd belsejében néhány új, H α -ban fényes csomót. A köd egyik legfényesebb csomójának a H α körüli színe azt mutatja, hogy a ködfolt -23 km/s sebességgel mozog a csillaghoz képest.

Gyenge vonalú T Tauri csillagokat azonosítottak a Cepheus flare területén a ROSAT adatbázis alapján. Spektroszkópiai vizsgálattal (Calar Alto Obszervatórium 2,2m-es távcső) 16 fősorozat előtti csillagot találtak. Meghatározták színektípusaikat (G8-K7) és V, I_C fotometria segítségével (mátrai RCC-teleszkóp) a luminozitásukat. Az eredményeket fősorozat előtti fejlődési modellekkel összehasonlítva a fősorozat előtti csillagok tömegére 0,3-1,6 naptömeget, korukra 0,2-20 millió évet kaptak (Kun M.).

Lezárták az FU Orionis típusú csillagok hosszú időskálájú változásait vizsgáló projektjüket. Az időbeli változások kimutatására az IRAS és az ISOPHOT 15 év különbséggel készült infravörös fotometriáját vetették össze. Nyilvánvalóvá vált, hogy a távoli infravörös hullámhosszakon tapasztalt állandóság (amit pl. a V1057 Cyg esetén nagyon tisztán ki lehetett mutatni) ellentmondásban van a jelenleg elfogadott modellekkel.

A V1647 Ori (IRAS05436-0007) jelű fiatal csillag 2004. januári FU Orionis-típusú kitörését követően összegyűjtötték a csillag kitörés előtti nyugalmi állapotából származó infravörös adatokat és megkonstruálták a csillag spektrális eloszlását. A becsült teljes luminozitás ($L_{bol} \approx 5,6L_{\odot}$) a kis tömegű T Tauri csillagokra jellemző, a csillagkörüli anyag tömege (0,5 naptömeg) azonban szokatlanul magas érték.

Megvizsgálták négy közepes tömegű UX Orionis-típusú fiatal csillag infravörös fényváltozását az ISOPHOT mérései alapján, és összevetették azokat az optikai fénygörbékkel. Az SV Cephei esetén érdekes korrelációt találtak az optikai és a távoli infravörös fénygörbe között. Ez az eredmény nem magyarázható az UXorok fényváltozásainak magyarázatára javasolt eddigi modellekkel.

Feldolgozták az OO Serpentis nevű 1995-ben kitört FU Orionis típusú csillag ISOPHOT-méréseit. Az OO Ser ISOPHOT-méréseit kiegészítették más ISO-mérésekkel, továbbá új 2004-es földi mérésekkel (WHT/LIRIS, és ESO 3,6m/TIMMI2), és elkészítették a csillag fénygörbéjét 10 különböző hullámhosszon a 2,2-100 μ m-es tartományban. A fénygörbékkel megállapították, hogy 25 μ m-en és alatta 2004-re befejeződött a kitörés, és a csillag visszatért a nyugalmi állapotba.

Meghatározták a konfúziós zajt az ISOPHOT műhold minden hosszú hullámhosszú szűrőjére ($\lambda \geq 90 \mu$ m), és mérési konfigurációjára. Cirrus konfúziós zaj becslést készítettek a távoli infravörös űreszközök detektoraira (Spitzer/MIPS, ASTRO-F/FIS, Herschel/PACS).

Az ISO Data Centre és az MTA KTM CsKI között létrejött szerződés keretében tovább dolgoztak az ISOPHOT adatok újraelértékelésén. Két új katalógusuk érhető el az ISO Archívumában: "Far-infrared ISOPHOT mini-maps of miscellaneous objects" - 48, illetve "Far-infrared ISOPHOT mini-maps of evolved objects" - 52 objektum méréseit tartalmazza.

A felsőléggör szerkezete (3 kutató, 1 MŰI pályázat)

Sok mesterséges hold egész Euráziából végrehajtott, régi, optikai megfigyeléseinek újrafeldolgozása alapján megállapították, hogy a semleges felsőléggör sűrűsége észak-déli aszimmetriát mutat, amely jelentősen erősebb a CIRA'86 modellben szereplőnél. A

modellmaradékok monoton csökkennek az északi 60 fok szélességtől a déli 60 fok szélességig, ameddig az észlelések rendelkezésükre álltak. Az aszimmetriának éves menete nincs. Munkahipotézisük szerint a jelenséget a két féltéke szárazföld- és az óceánborítottaság-beli különbsége és a geomágneses tér aszimmetriája hozhatja létre. Eredményeiket bemutatták Párizsban a COSPAR 35. kongresszusán.

Azon korábbi eredményüket, amely szerint a felsőléggörben fellépő sűrűségi hullámok amplitúdója bizonyos magasságban ugrásszerűen megnő, konvektív instabilitás fellépésével magyarázták.

Kisebb témák, interdiszciplináris kutatások (5 kutató, 1 MŰI pályázat)

A Naprendszer kis égitestei: A HST Advanced Camera for Surveys High Resolution Channel-jével (ACS/HRC) megfigyelték a 9P/Tempel 1 üstökös magját, arról pontos fotometriai fénygörbét készítettek és meghatározták a mag méretét és forgási periódusát. A megfigyelésekre a HST Cycle 13 GO 10115 programja (Rotation of comet Tempel 1) keretében került sor. A HST ACS/HRC megfigyelésekből a mag forgási periódusa $40,6 \pm 2$ óra. Az összes többi megbízható földfelszíni megfigyelést is figyelembe véve most úgy tartják, hogy a periódus $41,85 \pm 0,2$ óra. A HST mostani megfigyelései nélkül sokkal pontatlanabban volt ismert a forgási periódus.

A Rosetta üstökös-szonda cél objektumát, a 67P/Churyumov-Gerasimenko üstökös megfigyelték a NASA Spitzer (SST- Spitzer Space Telescope, korábbi nevén SIRTf) infravörös űrteleszkópja MIPS (Multi-Band Imaging Photometer for Spitzer) műszerével. Sikeresen detektálták a magot 24 mikronnál a termális infravörösben, továbbá a képeken a kiáramlott poranyag (dust trail) is megfigyelhető. A mag infravörös fluxusa időben változik, lényegében a mag forgását követve, tehát rendelkezésre áll az infravörös fénygörbéje.

Az 1689 Floris-Jan fő övbeli aszteroidáról eddig úgy tartották, hogy van egy nagyon rövid, néhány perces oszcillációja a fénygörbéjében az egyébként nagyon hosszú ismert forgási perióduson kívül. A piszkástetői RCC teleszkóp két különböző CCD kamerájával végzett fotometriai megfigyelések szerint nincs meg ez a rövid periódusú oszcilláció. Sőt, ha van egy második periódus a fénygörbében, akkor annak az eredetihez közelinek kell lennie és nem pedig néhány percesnek.

Elvégezték a Wild üstökös képfeldolgozását és kimutatták, hogy a jetstruktúra valamint a mag felszíni alakzatai között morfológiai kapcsolat van. Ez más megvilágításba helyezi a magkörnyék generális áramlási viszonyaiból levezetett jetmodell alkalmazhatóságát.

A beszámolási időszakban több száz üstökös és kisbolygó fotometriai és asztrometriai pozíciómérését végezték el.

A Stardust űrszonda megfigyelései a Wild 2 üstökös magjáról újabb érveket szolgáltatottak korábbi hipotézisükhöz, amely szerint az üstökösök eltérő keménységű "szubmagokból" épülnek fel.

Planetáris kutatások: Tanulmányozva a Cassini szonda képeit és méréseit arra a következtetésre jutottak, hogy azok már bizonyítják, hogy a Szaturnusznak az összetétel szempontjából két különálló forrásból származó gyűrűje van. A porgyűrűk ott is úgy jönnek létre, mint a többi óriásbolygónál. A Szaturnusznál azonban egy jéggyűrű is létezik (B+A gyűrű), amely egy nemrég szétdarabolódott óriás üstökösök maradványa lehet.

Az MGS űrszonda, két egymás utáni marsi tavaszon (2001, 2003), azonos déli sarkvidéki kráterben (150,8°W, -69,2°) készült felvételeit tanulmányozták (E07-00808, R07-00938). A 25 fokos dőlésű lejtőkön, 440 db sötét dűnefolton látható lefolyáson (DDS-seepage) végzett morfológiai analízis azt mutatta, hogy a fagyott CO₂/H₂O réteg alatt – a sötét dűnék felszínén – valószínűleg folyékony víz leszivárgását találták meg. A legérdekesebb új jelenség az, hogy a lejtők aljában a leszivárgott anyag/víz egy-két tucat méteres tavacskákban (pond) gyűlik össze.

Archaeoasztronómia: Sziderikus évek vizsgálatával sikerült nyomon követni és valószínűsíteni bizonyos csillagászati hagyományok keletkezését Kína időszámításában.

Csillagászat története: Megmutatták, hogy a változócsillagok első osztályozása az eddigi hiedelmekkel ellentétben nem Edward Pigott munkája, hanem Johann Christoph Sturmé, 70 évvel korábban. Kapcsolatot találtak az osztályozás és a korai reformátorok (elsősorban Melancthon) bizonyos elképzelései között.

Interdiszciplináris kutatások: Csillagászati időbeli változások elemzésére alkalmas matematikai eljárásból kifejlesztett hallásvizsgálati módszerükkel objektív módon kimutatták, hogy a már korábban is alkalmazott zeneterápia javítja a gyermekek hangdiszkriminációs képességét. A terápián átesett gyermekek szignifikáns többsége képes volt rövidebb szüneteket felismerni a zajszerű hangfolyamatban, mint amiket korábban észrevettek.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai: Együttműködtek a soproni GGKI-vel, az ELTE Gyógypedagógiai Főiskolai Kar, Foniátriai Tanszékével diszlexiás gyerekek vizsgálatában, valamint a Budapesti Műszaki Főiskolával, fényszennyezés témakörben az 'Ipari Környezetvédelem' c. tárgy keretén belül.

A beszámolási időszakban is részt vettek az egyetemi oktatásban előadások, gyakorlatok tartásával, valamint szakdolgozati és doktori témavezetéssel. Kutatóik az alábbi előadásokat, illetve gyakorlatokat tartották:

ELTE-n: Előadás: A csillagkeletkezés alapjai, Akkréciós folyamatok a csillagkeletkezésben, Asztrofizika 3, Asztrofizika 4., Az asztrofizika megfigyelési módszerei, Asztrostatisztika I., Csillagászat fizika tanári továbbképzésen, Csillagaktivitás - aktív csillagok I.- II., Csillagászat és kultúra, Csillagrendszerek dinamikája I. - II., Informatika a csillagászatban, Meteorcsillagászat, Obszervációs csillagászat 1., 2., 3., 4., Passzív csillagkörüli korongok szerkezete, Szférikus csillagászat interdiszciplináris alkalmazásai.

Gyakorlat: Bevezetés a csillagászatba II., mérési gyakorlat IV. éves fizikus hallgatók számára.

DE-n: Előadás: Bevezetés a csillagászatba, Plazma-asztrofizika.

SZTE-n: Előadás: Általános csillagászat, Galaktikus csillagászat, PhD kurzus.

Nemzetközi: Együttműködés az amerikai Spitzer infravörös mesterséges holdra benyújtandó pályázatok közös kidolgozásáról (MTA Csill. Kut., MPIA Heidelberg, STSI Baltimore, AIP Potsdam), GAIA asztrometriai űrmisszió változócsillag-munkacsoport, folyamatos részvétel a Nemzetközi Asztronautikai Akadémia munkájában, Együttműködés a Princeton University Observatory-val, automatizált változócsillagászati megfigyelésekben, MACHO - 'affiliált' programban való részvétel, a DPD katalógushoz nemzetközi együttműködések keretében kapnak észleléseket a következő obszervatóriumokból: Kiszlovodszk (Oroszország), Kanzelhoehe (Ausztria), Mount Wilson (USA), Abastumani (Grúzia), Ebro (Spanyolország),

Helwan (Egyiptom), Kijev, Lvov (Ukrajna), Kodaikanal (India), Ondrejov, Vassilicke Mezirici (Cseho.) és Tashkent (Üzbegisztán).

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai: OTKA (12 tematikus), Magyar Űrkutatási Iroda

Nemzetközi: argentin-magyar, német-magyar, olasz-magyar TÉT együttműködés, PRODEX és PECS együttműködés az ESA-val, Együttműködés az ESA ISO Data Centerrel, Heidelberg-ESA/ESTEC-Budapest együttműködés a galaktikus cirrusz vizsgálatára, COST action 283: "Computational and Information Infrastructure in the Astronomical Data Grid", MTA - Izraeli Tud. Akadémia közötti egyezmény, MTA és a JSPS közötti kétoldalú együttműködés, MTA-CNRS közös projekt, részvétel az EU FP6 European Interferometry Initiative JRP-ben.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Ábrahám P, Kóspál Á, Csizmadia Sz, Kun M, Moór A, Prusti T: "Long-term evolution of FU Orionis objects at infrared wavelengths", *Astron. & Astroph.* 428, 89 (2004)
2. Balázs LG, Ábrahám P, Kun M, Kelemen J, Tóth LV: "Star count analysis of the interstellar matter in the region of L1251", *Astron. & Astroph.* 425, 133-141 (2004)
3. Buchler, JR, Kolláth Z, Cadmus RR: "Evidence for Low-dimensional Chaos in Semiregular Variable Stars", *Astroph. J.* 613, 532-547 (2004)
4. Csizmadia Sz, Patkós L, Moór A, Könyves V: "Photometric study of the contact binary star V861 Herculis", *Astron. & Astroph.* 417, 745 (2004)
5. Groussin O, Lamy P, Jorda L, Tóth I: "The nuclei of comets 126P/IRAS and 103P/Hartley 2.", *Astron. & Astroph.* 419, 375-383 (2004)
6. Handler G, Shobbrook RR, Jerzykiewicz M, ..., Paparo M, et al: "Asteroseismology of the β Cephei star ν Eridani – I. Photometric observations and pulsational frequency analysis", *Monthly Notices R.A.S.* 347, 454-462 (2004)
7. Héraudeau Ph, Oliver S, del Burgo C, Kiss Cs, et al: "The European Large Area ISO Surv. - VIII. 90 μ m final analysis and source counts", *Monthly Notices R.A.S.* 354, 924 (2004)
8. Kövári Zs, Strassmeier KG, Granzer T, Weber M, Oláh K, Rice JB: "Doppler imaging of stellar surface structure – XXII" (2004)
9. Kun M, Prusti T, Nikolić S, Johansson LEB, Walton NA: "The IC2118 association: new T Tauri stars in high-latitude molecular clouds", *Astron. & Astroph.* 418, 89 (2004)
10. Madjarska MS, Doyle JG, van Driel-Gesztelyi L: "First evidence for magnetic reconnection along coronal hole boundaries", *Astrophys. J.* 603, L57-L59(2004)
11. Szabó R, Kolláth Z, Buchler JR: "Automated nonlinear stellar pulsation calculations: Applications to RR Lyrae stars. The slope of the fundamental blue edge and the first RRd model survey", *Astron. & Astroph.* 425, 627-639 (2004)
12. Tóth I: "Searching for the short timescale variations in the lightcurve of minor planet 1689 Floris-Jan in 1999 and 2002", *Astron. & Astroph.* 427, 363-369 (2004)
13. Tóth L, Gerlei O: "On the dynamic disconnection of rising omega loops", *Solar Physics* 220, 43-59 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	61	Ebből kutató ² :	30
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			174
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			131
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	73	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	1
nemzetközi együttműködés keretében:	37	SCI által regisztrált folyóiratban:	34
összesített impakt faktor:	108,09	összes hivatkozás száma ⁴ :	440
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			440
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	-
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	3	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	3
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	48	poszterek száma ⁶ :	22
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			15
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			275 MFt
Beruházási támogatás:	3 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	1
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			12
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		23 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			-
NKFP:	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Egyéb:	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			4
EU forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		1,3 MFt
Egyéb: 3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		20 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			7
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		9 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			- MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

Piszkéstetőn a szokott karbantartásokon kívül a következő apróbb műszaki előrelépések történtek 2004-ben:

1. A Cassegrain távcsövön az elektromechanikus óragépet üzemszerűen is kiváltották léptetőmotoros hajtással.
2. Helyreállították az RCC távcső résnyitásának rádióvezérlését.
3. Az RCC kupola számítógépes mozgatásához elkészült a hardver (mechanika és elektronikai).

KFKI ATOMENERGIA KUTATÓINTÉZET
1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33., 1525 Budapest, Pf. 49.
Telefon: 395-9159, Fax: 395-9293
e-mail: gado@sunserv.kfki.hu, honlap: www.kfki.hu/~aekihp/

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet fő kutatási feladatai a következő tudományterületekre terjednek ki: reaktorfizika, termohidraulika, fűtőelemek és reaktoranyagok vizsgálata, operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése, atomerőművi szimuláció, anyagtudomány, sugárvédelem és környezetfizika, valamint a Budapesti Kutatóreaktor köré csoportosuló kutatások.

Az intézet tevékenységében 2004 folyamán is az alaptevékenység gerincét jelentő reaktorbiztonsági kutatások voltak a meghatározóak. A 2004. évi tevékenységre is hatással volt még, hogy a 2003. áprilisában Pakson bekövetkezett súlyos üzemzavar jelentős mennyiségű többletfeladatot rótt az intézetre, mind az atomerőmű mind az Országos Atomenergia Hivatal részéről. Ezen feladatokat úgy sikerült megoldani, hogy a kutatás is eredményesen folyhatott.

A Budapesti Kutatóreaktor biztonságos üzemeltetése, a kutatási lehetőségek folyamatos fejlesztése és így világszínvonalon tartása is jelentős feladata az intézetnek.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Reaktorfizikai kutatások (11 kutató, ráfordítás kb. 170 MFt, pályázat kb.100 MFt)

Folytatódott a bizonytalansági vizsgálatok ("uncertainty analysis") reaktivitás balesetek biztonsági elemzése során történő alkalmazhatóságának tanulmányozása. A bizonytalansági elemzéseket eddig csak a termohidraulikai biztonsági elemzések során használták. A módszer lényege, hogy a kezdeti és határfeltételek eddigi halmozottan konzervatív módon való figyelembevétele helyett valószínűség-számítási módszerrel határozzák meg a biztonsági elemzések eredményeinek bizonytalanságát. 2004-ben az AEKI a Reaktoranalízis laboratóriumában az SZBV kazetta kilökődés kezdeti eseményt elemezték. A vizsgálatok a reaktorfizikai kiindulási feltételek konzervatív keretparaméterei és a best-estimate értékek felhasználásával folytak, aminek során a „GRS módszert” alkalmazták. Kiválasztották a tranziens szempontjából lényeges paramétereket. Megvizsgálták, hogy ezen paramétereknek milyen eloszlását és burkoló értékeket lehet feltételezni. Statisztikai módszerekkel konkrét paraméter sorozatot sorsoltak, és elvégezték a számításokat. Az output paraméterek a teljesítmény illetve hőmérséklet értékek, illetve azok bizonytalanságai voltak. Meghatározták az output paraméterek bizonytalanságát adott valószínűséggel, adott konfidencia intervallum mellett. Fontos információt szolgáltatott a kiegészítő érzékenységi vizsgálat is.

Meghatározták a tároló és szállító berendezések szubkritikusságának számítási bizonytalanságát. Erre az erőművekben megfigyelhető tendencia, a dúsítás tervezett növelése és a kiégő

méreg alkalmazása miatt volt szükség. A kiegészítő méreg jelenléte felvetette a számítások magfizikai adatok bizonytalanságából származó hibájának megváltozását, aminek meghatározása nem triviális feladat, elegendően nagyszámú, zero teljesítményű reaktorokon végzett kritikussági mérés számításokkal való összevetését, az eredmények statisztikai analízisét tette szükségessé. Az AEKI-ben is használt statisztikai módszert, valamint a NUREG/CR-6361 és ANSI-ANS-8.17 dokumentumok ajánlásait alkalmazták. A munkát az is indokolta, hogy a közelmúltban jelentek meg az ENDF/B-VI file újabb, 6-8. sorszámú verziói, amelyekben az eddigiéknél pontosabb adatok találhatóak, ami viszont a számítási hiba csökkentésének irányában hatott. A kritikussági méréseket tartalmazó "International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments" című kiadvány legújabb, 2003. évi változata is újabb mérésekkel egészült ki, ami szintén befolyásolta az eredményeket. Az újabb vizsgálatok során felhasználták a bóros lemezeket, kiegészítő mérget és MOX fűtőelemeket tartalmazó kísérleteket is. Az eddigiéknél nagyobb számú mérés felhasználása révén kapott jobb statisztika lehetővé tette egy új, az eddigiéknél kisebb biztonsági korlát bevezetését.

A transzmutációs rendszerek további kutatása során részt vesznek abban a NAÜ CRP programban, amelynek feladata a következő generációs erőművi rendszerekben lezajló folyamatok vizsgálata. 2004-ben is tovább folytatódtak a reaktorfizikai vizsgálatok és fejlesztések a szuperkritikus termohidraulikai tartományban működő HPLWR (nagy hatásfokú könnyűvízes reaktor) témában. Az EU 6. keretprogramban való sikeres részvételhez szükség volt egy 1 éves felkészülési időszakra, melynek során a kiegészítő számításokhoz szükséges, jelenleg még hiányzó négyzetes diffúziós reaktorfizikai kódot létrehozták a meglévő, illetve elérhető eszközök alapján.

2004-ben megkezdődött a zónatervezés során használt KARATE programrendszer teljes, újbóli validálása, amire az új fűtőelemek számításának céljából bevezetett változtatások miatt volt szükség. A munka során legnagyobb részt az indítási mérések eredményeit kellett felhasználni.

Termohidraulikai kutatások (13 kutató, ráfordítás kb. 270 MFt, pályázat kb. 160 MFt)

A Paksi Atomerőmű tervezett élettartamon túli üzemeltetés előkészítését szolgáló projekt tervében megfogalmazott feladatok végrehajtása a fáradásos elemzést igénylő reaktor rendszerelemek (RRE-k) vonatkozásában egy olyan adatbázis létrehozását igényli, hogy az elkészítendő adatbázis alkalmas legyen a vizsgálatba bevont berendezésekre vonatkozó ciklikus szilárdsági analízis elvégzésére.

A primerköri berendezések ciklikus szilárdsági számításai eredetileg a primerköri hőséma különböző üzemiállapotaiból kiindulva készültek oly módon, hogy a hőmérsékleti tranziensből eredő hatásokat elhanyagolták. A nagy tömegű és vastag falú edények esetén azonban az eredeti orosz főkonstruktori elemzések is figyelembe vették a hőmérsékleti tranzienseket, mert a meglévő cseh számítások hivatkoznak az orosz hőmérsékletmező meghatározását végző számításokra, amelyek eredményeit azután a ciklikus szilárdsági elemzéseknél felhasználták. Ezeknél az edényeknél a jövőbeni számításoknál szükség lesz a reális hőmérsékleti görbékre olyan esetekben, amikor a hőmérsékletváltozás a tranziens során meghaladja a 20-30 °C-t. A reaktor belső részeinek elemzéseire számításokra lesz szükség ahhoz, hogy olyan mennyiségeket generálhassanak, amelyekkel ezen elemek ciklikus szilárdsági számításai elvégezhetők.

A 2004. évben az ERŐTERV Rt. megrendelésére az adatbázis létrehozását elvégezték, ahol az adatszolgáltatás kiterjedt a hőmérsékleteken kívül a nyomás, térfogatáram és nyomásesés adatokra, valamint – ahol lehetséges volt – a hőátadási tényezőkre is. Elvégezték a rendszerek és a számítógépi modellezés egyes elemeinek összerendelését. A teljes átvizsgált elemzések száma 70 volt. Megvizsgálták, hogy az egyes kezdeti események esetén melyik tranziens adja a legnagyobb terhelést a vizsgálatba bevont szerkezeti elemekre. Mivel a terhelés berendezés specifikus, ezért megadták minden aleset eredményeit.

A Paksi Atomerőmű Végleges Biztonsági Jelentéséhez elkészültek az üzemzavar elemzések. A mintegy 50 esetet és azon belül számos alesetet tartalmazó elemzéscsokor eredményei bizonyították, hogy az elfogadási kritériumok teljesülnek, egyetlen esetben van kiegészítő vizsgálatra szükség. A PA Rt. megrendelésére megkezdték azokat a termohidraulikai számításokat is, amelyek ahhoz szükségesek, hogy input adatokat szolgáltatassanak a nyomás alatti hősokk (PTS) elemzésekhez.

Az üzemanyag kazettán belüli keveredési folyamatok kísérleti és analitikus vizsgálatára megtörtént a mérőberendezés és mérési módszer kiválasztása, hogy a számítógépes modellezés validálható legyen, valamint a megépítendő mérőszakasz tervei elkészültek. Áttekintve a mérési lehetőségeket és azokat a körülményeket, ahol a méréseket el kell végezni, az a vélemény alakult ki, hogy ezeknél a méréseknél a PIV technika alkalmazásától várható a legtöbb információt adó eredmény.

A PMK-WAHA a paksi atomerőmű termohidraulikai modellje a térfogatokra és a teljesítményre vonatkozó 1:2070 kicsinyítési viszonytal és 1:1 magassági viszonysszámmal. A modell primerköri nyomása az erőművi névleges 12,3 MPa, az üzemi hőmérséklet 570 K, a hűtőközeg forgalom 4,5 kg/s, ugyancsak névleges. A modell szekunder oldalán a névleges gőznyomás 4,6 MPa, a hőmérséklet 493 K. A primerkört a tervezett mérésekben arra használják, hogy a gőzfejlesztőn keresztül gőzt termeljenek és a vizsgálandó csőszakaszt a szekunder körben elhelyezve végezzék a kondenzációból eredő vízütéses méréseket.

Saját kezdeményezésű kutatás keretében a 200 mm átmérőjű és 5000 mm hosszú csőszakasz, a továbbiakban mérőszakasz, tervezése befejeződött, gyártása, kivitelezése és beépítése a rendszerbe folyamatban van, amelyet már egy elnyert GVOP AKF pályázat fog finanszírozni.

A kondenzációból eredő vízütés vizsgálatának fontosságát jelzi, hogy a 2004. év elején sor került az eredmények közvetlen ipari alkalmazására is, mikor a Tiszai Vegyi Kombinátban az üzembe helyezés alatt álló ipari erőmű és hőközpont között kiépült magas vezetőségű gőzvezeték felmelegítés közben valószínűleg vízütés érte. Az eredményeik felhasználásával a TVK felkérésére egy szakvéleményt készítettek, amelyben meghatározták a vízütés okát, megvizsgálták a vízütés létrejöttének feltételeit és elemezték ezen feltételek teljesülését.

Az Európai Unió 5. keretprogramján belül három kutatási téma is befejeződött. Az IMPAM-VVER projekt keretében a korábban elvégzett kísérletek segítségével a számítógépi programok validációja történt meg, az AEKI a RELAP5 kóddal végzett elemzéseket. Kimutatták, hogy – a kísérleti eredményekkel egyezően – amennyiben a nagynyomású üzemzavari hűtőrendszer nem lép üzembe egy közepes méretű primerköri hűtőközeg-vesztés során, akkor a primerköri lefúvatás sem tudja megakadályozni a zóna túlhevülését. A

hidroakkumulátor nyomásának csökkentése viszont oda vezet, hogy a primerkörü lefűvátás indításának feltételei létre sem jönnek. Bár a folyamatokat globálisan a RELAP5 helyesen számolja, egy adott zónaszinthez tartozó túlhevülést valamelyest alábecsli.

Az ECORA és a FLOMIX-R projektben az AEKI a FLUENT kóddal végzett számításokat a PANDA ill. ROMIX kísérleti berendezésre. A konténmentbe történő nagy-impulzusú befecskendezés esete – a többi résztvevő eredményeivel összehasonlítva – jó eredményt szolgáltatott, de a kísérletet az előkészítő munkák elhúzódása miatt a svájci fél még nem végezte el. A reaktor hidegágától az aktív zóna belépéséig létrejövő keveredést a kóddal minőségileg helyesen lehetett számolni, de a koncentráció számszerű értékének eloszlása a zóna keresztmetszetben még pontosításra vár. Mindkét esetben nehezítette a következtetések levonását, hogy rács-független megoldásokat – a számítógépes kapacitás behatároltsága miatt – nem sikerült elérni.

Fűtőelem és reaktoranyag kutatások (18 kutató, ráford. kb. 370 MFt, pályázat kb. 200 MFt)

A reaktortartályok élettartam meghosszabbítási programjához alapvetően fontos a sugárkárosodás elridegítő hatásának az ismerete. A kutatások témái: a foszfor hatása az acélok viselkedésére, és az ún. mestergörbe alkalmazása az elemzésekben, valamint a virtuális anyagvizsgáló reaktor fejlesztése folyt EU projektek keretében. NKFP projekt keretében a paksi blokkokhoz hasonló anyagokon gyűjtöttek adatokat a reaktor belső plattírozás sugárkárosodására, a besugárzott reaktoranyagok hőkezeléssel való felújításának lehetőségére, és a régi próbatestekből (eredeti ellenőrző próbatestek, amelyekből már nincs archív anyag Pakson) gesztéssel új próbatestek készítésére.

Az EU 6. keretprogram keretében sikerrel pályáztak a COVERS konzorciumban. A pályázat célja a VVER reaktorok élettartamának meghosszabbításával kapcsolatos ismeretek összegyűjtése és cseréje. A projekt két tudományos munkacsoportjából (workpackage) az egyiket az AEKI vezeti (Szerkezeti anyagok öregedése). Részt vettek a HOTLAB, AMES, NESC, ATHENA EU hálózatok munkájában, előadásokkal, írott anyagok készítésével és szervezéssel is.

Elkészült az első hazai fejlesztésű fűtőelemkód, a FUROM első változata. A kóddal számos sikeres validációs számításra került sor, amelyekben a számítások általában jól adták vissza a fűtőelemekkel végzett kísérletek fő eredményeit. A kód előreláthatóan a Paksi Atomerőmű különböző szoftvereibe is beépítésre kerül.

Cirkónium ötvözetből készült fűtőelem burkolatanyaggal olyan kísérletekre került sor, amelyekben a fém oxidációja hidrogéndús gőzben történt. Ilyen körülmények súlyos reaktorbalesetek során léphetnek fel, amikor a cirkónium oxidációjakor keletkező hidrogén feldúsul a gőz atmoszférában. Az elvégzett mérések rámutattak, hogy a hidrogén jelenléte miatt lassul a cirkónium oxidációja, de ezzel egy időben számottevő hidrogén-felvételre is sor kerül, ami a burkolat jelentős elridegedéséhez vezet.

Folytatódtak a rövid fűtőelemrudakkal végzett ruténium kibocsátási kísérletek. A mérési technika tökéletesítésével sikerült felállítani a fűtőelemekből magas hőmérsékletű levegőn kibocsátott ruténium pontos anyagmérlegét a különböző mintavételi helyek figyelembe vételével. A gázhalmazállapotban kibocsátott ruténium-oxidok részaránya legfeljebb 10-20%-

ra tehető, a többi ruténium-oxid szilárd állapotban lerakódik a berendezés hideg felületein. Ez arra utal, hogy egy reaktorbaleset során – hasonló körülmények között – a zónából kikerült ruténium nagy része a reaktor és a primerkör hidegebb szerkezeti elemein rakódik le.

Az AEKI javaslatára hajtották végre a Karlsruhe-i FZK intézetben a QUENCH-10 mérést, ami egy pihentető medencében lejátszódó balesetet modellezett. A kísérlet előkészítésén túl az AEKI szakértői a mérésben aeroszol mintavételezéssel és a minták kiértékelésével vettek részt. Az eredmények részletes információt szolgáltatnak a magas hőmérsékletű folyamatban kibocsátott aeroszolak mennyiségéről, anyagi összetételéről és jellemző méretéről.

A paksi üzemzavart követően jelentős aktivitás került ki a paksi pihentető medence, illetve a sérült üzemanyagot tároló 1. sz. akna vizébe. A mért adatok részletes feldolgozásával lehetővé vált az egyes izotópok integrális kikerülésének meghatározása. Ezek az adatok tudományos szempontból is érdekesek, hiszen sérült fűtőelemekből származó kikerülésre nagyon kevés tapasztalat áll rendelkezésre. A kikerülési adatok értékelése az üzemzavar következményeinek elhárításához is fontos adatokat szolgáltat, mivel a sérült üzemanyag további tárolásának tervezéséhez elengedhetetlenek a sérült fűtőelemekből származó radioaktív kikerülésre vonatkozó ismeretek.

Operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése (11 kutató, ráfordítás kb. 200 MFt, pályázat kb. 130 MFt)

Az MTA SZTAKI által vezetett 2/016/2001 számú NKFP projektben befejeződött a “Tudásintenzív információs technológia bonyolult ipari rendszerek biztonságos és optimális működtetéséhez” elnevezésű (röviden COSMOS) keretrendszer kidolgozása. A projekt elsődleges célkitűzése a modern információs technológiák közvetlen ipari alkalmazása volt. A fejlesztési munka eredményeképpen létrejött a COSMOS keretrendszer. Ennek bázisán olyan információs rendszereket lehet kialakítani, amelyek alkalmasak bonyolult technológiai folyamatok paramétereinek és a paraméterek közötti összefüggések folyamatos figyelésére, az egyedi berendezések és az egész technológia meghibásodásának jelzésére, diagnosztizálására, a meghibásodások elsődleges okainak felderítésére, a berendezések optimális működtetésére vonatkozó operátori tanácsadásra. Az on-line feladatok kezelése mellett az eszköztár off-line feladatok megoldásához is tartalmaz modulokat: ezek segítségével pl. az ipari rendszer berendezéseinek kezelési utasításai strukturális rendben tarthatók és az on-line rendszerben történő megjelenítésre alkalmas formába hozhatók. Off-line eszköz a VR (Virtuális Valóság) tervező és a VR oktató modul, ezekkel a tervezett beavatkozások és átalakítások biztonsági, üzemeltethetőségi és ergonómiai következményei az optimális megoldás kiválasztásának céljából előzetesen vizsgálhatók (az ún. virtuális valóság technika alkalmazásával), továbbá megvalósítható a személyzet alapos oktatása. 2004-ben megtörtént a COSMOS keretrendszer integrálása és tesztelése, ezt követte a két ipari mintarendszer végleges verziójának kiépítése, bevizsgálása. A projekt munkája a felhasználói és üzemeltetői dokumentáció kiadásával, valamint a projekt zárójelentés elkészítésével zárult.

Folytatódtak a Paksi Atomerőmű VERONA zónaellenőrző rendszerének modernizálási munkái. A 3. blokkon sikeresen lezárult az új, Windows alapú osztott architektúrában működő reaktorfizikai feldolgozó rendszer egyéves próbaüzeme. A rekonstrukció során a következő lépés az új rendszer számítástechnikai Rendszertervének kiadása volt, majd ennek alapján megkezdtek a modernizált rendszer moduljainak programozását. Új, osztott VERONA

rendszer került a teljes léptékű szimulátor mellé is, az oktatás kiszolgálására. Az új rendszer az eddiginél jóval részletesebb és gyakoribb zónaanalízist tesz lehetővé, és távlatilag alkalmas a reaktor tervezett teljesítménynövelésének megfelelő kiszolgálására. Az átalakítás során alapvető átalakuláson megy át a rendszer "felső" (adatfeldolgozó) szintje, miközben az adatgyűjtő szint változatlan marad. Az új architektúra Windows operációs rendszer alatt futó, nagyteljesítményű számítógépekből áll, az adatfeldolgozás redundáns szerverpárokon folyik. A hardver és alapszoftver felújítása mellett az alkalmazói szoftver is alapvetően átalakul: a jelenlegi, főleg FORTRAN alapú kódrendszert nagyrészt C/C++ alapon újraírják, továbbá új alapeszközöket alkalmaznak (pl. SQL alapú archiválás, új megjelenítő rendszer, stb.).

2004-ben a Paksi Atomerőműben működő zajdiagnosztikai rendszerek hardver és szoftver eszközeinek rekonstrukciója egy kisebb terjedelmű, prototípus zajdiagnosztikai adatgyűjtő rendszer kidolgozásával és blokki telepítésével folytatódott. A modern adatgyűjtő eszközöket és osztott architektúrában üzemelő mérő-feldolgozó munkaállomásokat tartalmazó új rendszer helyszíni bevizsgálása 2004-ben részben megtörtént, a próbák 2005 során folytatódnak.

Atomerőművi szimulációs kutatások (7 kutató, ráfordítás kb. 110 MFt, pályázat kb. 70 MFt)

Fűtőelemkazetta számításokat végeztek három különböző modellezési szinten. Direkt numerikus szimulációval megmutatták, hogy csökötegekben – korábbi mérési eredményekkel összhangban – áramlási pulzáció zajlik, amely képes megnövelni a kötegen belüli keveredést. Nagy örvény szimulációval megmutatták, hogy magasabb Reynolds számú áramlásoknál az áramlási pulzáció jelensége háttérbe szorul és a magasabb keveredés ebben a tartományban nagy valószínűséggel másodlagos áramlási jelenségekkel magyarázható. Reynolds-átlagolt megközelítést alkalmazva rámutattak, hogy valóság-hű eredmények elérése érdekében turbulencia modellként Reynolds-feszültség modellt kell alkalmazni. Előre jelezték továbbá, hogy a kazettafajban cirkuláció zajlik, amelyet később numerikus számítások is igazoltak. A kazetták távtartóinak hatását vizsgálva előzetes számításokat végeztek. Elkészítettek egy teljes kazetta modellt, amelyet a közeljövőben a részletes áramlási jelenségek megismerésére használhatnak fel.

Új numerikus algoritmust alkalmaztak kétfázisú áramlások nagy pontosságú számításához egydimenzióban és továbbfejlesztették háromdimenziós áramlások vizsgálatára. A módszer pontosságát numerikus kísérletekkel igazolták. Gáttörést modellezve simított részecske hidrodinamikai programrendszert készítettek és teszteltek.

Anyagtudományi kutatások (16 kutató, ráfordítás kb. 220 MFt, pályázat kb. 100 MFt)

A roncsolásmentes aktivációs analitikában (INAA) egyre nagyobb jelentősége van a szelektív besugárzásnak. Megtörtént a bóros árnyékolású besugárzásokhoz kifejlesztett bór karbid (B₄C) szűrők optimalizálása, legyártása. Az új besugárzó tokok biológiai anyagok és üvegyapot minták epitermikus neutron aktivációs analitikai vizsgálatára előnyösen alkalmazhatók. Az előzetes eredmények igazolták, hogy szemben a hagyományos aktivációs analitikával, a szelektív besugárzás a mintákban mikrokoncentrációban előforduló, pl. As, Cd, Mn, Sb élettani szempontból fontos elemek nagyérzékenységű, gyors és nagy pontosságú meghatározását teszi lehetővé.

Befejeződött a micelláris rendszerek határfelületének közelében elhelyezkedő vízmolekulák diffúziós tulajdonságainak vizsgálatát célzó kísérletsorozat első fázisa. A kvázi-elasztikus neutronszórással és gradiens NMR-rel végzett kísérletek egybehangzóan azt a felfogást valószínűsítik, hogy a víz a felületaktív molekulák hidrofil csoportjának az oxigén- és nitrogén atomjával hidrogénkötést alkot, aminek következtében lelassul a micellák közelében található vízmolekulák diffúziós mozgása. A lassú vízmolekulák meghatározzák a micellák között kialakult legkisebb megközelítési távolságot.

Szisztematikus adatgyűjtés folyt az etoxilált nonil-fenol micellákon a hidrofil lánc hosszának, az oldat koncentrációjának és hőmérsékletének függvényében. Elkezdődött a statikus kisszögű neutron- és röntgen-, illetve dinamikus fényszórással, valamint precíziós sűrűség- és rotációs viszkozimetriával végzett kísérletek eredményeinek az értelmezése. A gradiens NMR technikával kapott előzetes eredmények trendje ellentmond a dinamikus fényszórás-kísérleteknek.

Szimulációs módszer kifejlesztése történt meg a folyadék-gőz fázisegyensúly és fázisátalakulás leírására áramló rendszerekben, melynek segítségével vizsgálható a határfelület hatása a fenti folyamatokra. Folyadék-folyadék fázisegyensúlyok leírása történt meg komplex rendszerekben (makromolekulás oldatok, makromolekulás elegyek, metastabil folyadékok).

Metil-szubsztituált piridinek oldhatósági viszonyaira vonatkozó kutatás keretében kétféle módszerrel kiszámították a molekulák hidratációs szabadenergiáját. Az eredmények azt mutatják, hogy az oldószer és oldott anyag molekulái közötti Lennard-Jones kölcsönhatás fontos szerepet játszik a metil-szubsztituált piridinek vízzel való elegyedési viselkedésében. Kiszámították monomer és dimer ón-dibromid molekulák, valamint a dimerizációs reakció termodinamikai függvényeit a molekulák elektrondiffrakcióval és kvantumkémiai számításokkal meghatározott szerkezetek alapján.

A korróziós kutatások területén elkezdődtek a rozsdamentes acél egyenes korróziója mechanizmusának meghatározására irányuló kutatások. Rozsdamentes acél, polikristályos vas és különböző orientációjú vas egykristály mintákon elektrokémiai és felületanalitikai mérések történtek. Az eredmények értékelésére analitikus modell került kidolgozásra, mely leírja a töltéshordozók vándorlását a felületi oxidrétegben. A munka része az EU 6. keretprogramjában szereplő PERFECT projectnek.

Befejeződött a magas hőmérsékletű referenciaelektrodok tesztelésére irányuló EU 5. keretprogrambeli projekt, melynek fő célkitűzése az atomerőművek primer körében is használható elektród kifejlesztése volt. Az eredmények alapján három elektródtípus bizonyult megfelelőnek, melyből kettő használhatónak bizonyult a működő atomreaktorok körülményei között is.

A korábbi kutatási jelentések publikálhatósága céljából kiegészítő mérések történtek az „European Nuclear Thermodynamic Database” (Enthalpy Project) keretében vizsgált fázisegyensúlyokhoz ($B_2O_3 + Fe_2O_3 / ZrO_2 / UO_2$),.

Átépítésre került a korábban gőznyomás-izotópeffektusok nagy pontosságú mérésére szolgáló kísérleti berendezés (differenciál-manométer + nagyvákuum-rendszer) és kísérleti program indult az „EFDA Measurement of the Gas Permeation through seal material and outgassing

measurements” projektkeretében különböző szigetelő anyagok és gázok diffúziós tulajdonságának meghatározására.

Sugárvédelmi és környezetfizikai kutatások (18 kutató, ráfordítás kb. 260 MFt, pályázat kb. 150 MFt)

Az alfa- és a neutronsugárzás biológiai hatását vizsgálták in vitro sejtkísérletekben. Megállapították, hogy a mutáció gyakorisága kisebb a bystander- mint a direkt besugárzott sejtekben. Alfa-sugárzás indukálta bystander effektust mutattak ki mind médiumtranszfer mind dupla sejtrétegű sejtkísérletekben. Adaptív választ a bystander sejtekben is mértek, ami bizonyítja, hogy a bystander effektusnak van pozitív biológiai hatása is.

Numerikus áramlástani számításokat végeztek a centrális légutak három-dimenziós modell geometriáján. A $k-\omega$ turbulencia modell alkalmazásával megállapították, hogy időfüggő áramlás esetén a kiüledés mértéke intenzív a be- és kilégzés váltásakor. Egy új modellt fejlesztettek ki a légutak epithel sejtjei és sejtmagjai geometriájának szimulálására, amely lehetővé teszi az inhalált radon leánytermékekből kibocsátott alfa-nyomok sejttalálati valószínűség-eloszlását a centrális légutak epithel sejtjeiben uránbányászok reális eseteire.

Belső sugárterheléssel kapcsolatos EU projektek keretében elvégezték az összehasonlító belső dózisterhelés-meghatározási program szervezési munkáit, valamint elkészítették a belső sugárterhelés meghatározására vonatkozó általános módszertani irányelv interneten is hozzáférhető első változatát.

Az Országos Atomenergia Hivatal számára elkészült a SINAC elnevezésű nukleárisbaleseti következményelemző számítógépes program új változata, amely a kezelői szolgáltatások területén jelentett számottevő fejlesztéseket.

A paksi atomerőmű rekonstrukciójával kapcsolatban számos feladat elvégzésére került sor: az új Kibocsátás- és Környezetellenőrző Rendszer létesítése a befejező szakaszába ért, az elmúlt évi elemző vizsgálatok alapján pedig megkezdődött az erőművi dozimetriai monitorozó rendszer primerköri egységeinek felújítása. Az év folyamán beindultak a "Végleges biztonsági jelentés" 12. fejezetéhez kapcsolódó elemzések és számítások is (a radioaktív sugárzás forrásai, dózistérképek stb.). Az 1. akna helyreállításához kötődő tevékenység sugárvédelmi tervezésével kapcsolatban szakértői tevékenységet végeztek.

Mikro-röntgenabszorpciós módszert fejlesztettek ki a plutónium kémiai állapotának roncsolás-mentes vizsgálatára szilárd fázisú részecske standardok felhasználásával. A thulei repülőgép-baleset helyszínén vett üledékmintákból azonosított forró részecskék a plutónium oxidációs állapota alapján két csoportra voltak elkülöníthetők, melyek közül az egyikben a Pu(IV), a másikban a Pu(VI) volt domináns forma. Ugyanazokban a részecskékben mérve a plutónium és az urán oxidációs állapota között nem mutattak ki korrelációt. Röntgenmikrotomográfiával bizonyították, hogy az azonosított részecskékben az urán és a plutónium térbeli eloszlása azonos.

A Nemzetközi Űrállomás *Destiny* (NASA) ill. *Zvezda* (RKA) moduljára telepített, az AEKI által készített *Pille* dózismérő rendszerek gondozása során a mérési adatokat feldolgozták és

előkészítették az ezzel végzett tudományos kísérleteket. Földi kalibrációs méréseket is végeztek részecskegyorsítókban a *Pille* rendszerrel.

Repülés alatt ellenőrizték az *ESA Rosetta* üstökös-kutató szonda *Philae* leszálló-egységére készített plazma- (*ROMAP/SPM*) ill. por-detektort (*SESAME/DIM*) és a repülő-egységek földi referencia-modelljét fejlesztették. Részt vettek a Nemzetközi Űrállomás *Columbus (ESA)* moduljának külső platformjára kerülő *EuTEF-Dostel* félvezető-teleszkópos dózismérő berendezés elkészítésében.

Három félvezető-detektoros teleszkópból felépített, teljes térszögű (4π) dózismérő berendezést (*TRITEL*) fejlesztettek ki, melynek kísérleti példánya majd a Nemzetközi Űrállomás orosz szegmensén (*RKA*) repül.

A Nemzetközi Űrállomás *Zvezda (RKA)* moduljában az elsődleges és másodlagos kozmikus sugárzás dózisviszonyait mérték meg szilárdtest nyomdetektorokból felépített passzív mérőegységekkel (*BRADOS-3 projekt, RKA*).

Részt vettek a kis és nagy energia-leadású elsődleges kozmikus sugárzás védőrétegben kialakuló mélységi eloszlásának vizsgálatában a *Proton-5* műhold külső felületén (*BIOPAN projekt, közös ESA és RKA*); illetve az előkészítési munkálatokban.

Űrsétát szimuláltak, melynek során a Nemzetközi Űrállomás külső felületéhez rögzített emberszerű fantom belső szerveiben és az űruha belső felületén elhelyezett detektor csomagokban mérték az űrhajósok dózisterhelését (*Matroshka projekt, ESA*).

Az *Icaros-Net* EU projekt keretében műholdfelvételek alapján meghatározott aeroszol optikai mélységet validálták felszíni napspektrofotométeres mérésekkel. Ehhez, felszíni levegőminőség (aeroszol, gáz) és meteorológiai méréseket végeztek a műholdátvonulás idején.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének fő eredményei

2004-ben jelent meg a Handbook of Prompt Gamma Activation Analysis with Neutron Beams c. kézikönyv a Kluwer Academic Publishers kiadónál (Dordrecht, Boston, London) ISBN 1-4020-1304-3 (2004). A könyvet legnagyobb részt az Izotóp- és Felületkémiai Intézet Nukleáris Kutatások Osztályának munkatársai írták. A könyv mintegy felét a természetben előforduló elemek prompt-gamma spektrumait, valamint a legjelentősebb gamma-vonalak spektroszkópiái adatait tartalmazó atlasz teszi ki. Valamennyi spektrum a BNC PGAA berendezésén készült.

Befejeződött a repülési idő spektrométer áthelyezése a hidegcsatornáról a termikus csatornára. Ehhez kapcsolódva felépült a reaktor épületéhez csatlakozó TOF csarnok. Jelenleg a berendezés működési engedélyének kiadásához szükséges mérések folynak.

Az in-beam Mössbauer berendezés beruházása 2004-ben véget ért. Az új, Európában unikális mérési lehetőség jelentősen kibővítheti a nagyérzékenységű Mössbauer technika alkalmazását további kb. 30 mag esetére. Ezzel új lehetőségeket kap egyebek között a katalizátorok vizsgálata. Jelenleg az üzembe helyezéshez szükséges mérések folynak.

Az EU FP6 keretprogram támogatásával 2004-ben 177 nap mérési időt igényeltek a felhasználók, ami meghaladja a szerződésben az EU-nak felajánlott keretet. Figyelembe véve

a hamarosan munkába álló két új berendezést (a repülési idő spektrométert és a Mössbauer berendezést) megjósolható az igények gyors növekedése.

A kutatóreaktor neutronforrásként alkalmazó kutatásokról szóló részletes beszámoló az SZFKI, a KK IKI intézeti beszámolóiban, illetve jelen beszámoló anyagtudományi részében találhatóak.

Az eredmények gazdasági-társadalmi haszna

A fentebb ismertetett reaktorfizikai, termohidraulika és atomerőműi szimulációs kutatások valamint az operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztésének eredményei alapvetően két területen hasznosulnak. Az első terület a magyar atomerőmű, ahol a kutatási eredmények egy részének közvetlen műszaki megvalósulása végbemegy. A másik terület a magyar nukleáris hatóság (OAH), ahol az ellenőrzés, engedélyezés, felügyelet minőségének javulása az eredmények hasznosulási formája. Jó példa erre a 2003-ban történt súlyos üzemzavar, amelynek következményeit az intézet segítségével sikerül felszámolni. Részben ugyanezen a két területen hasznosulnak a fűtőelemek és reaktoranyagok kutatásának valamint az anyagtudományi, sugárvédelmi és környezetfizikai kutatásoknak az eredményei is. Mindezen területeken azonban jelentős az eredmények nemzetközi hasznosulása is. Jó példa erre, hogy az intézetben folyó fűtőelemkutatások eredményeként ma a nemzetközi gyakorlatban a RIA (reactivity induced accident – reaktivitás eredetű baleset) és LOCA (loss of coolant accident – hűtőközeg vesztéssel járó baleset) kritériumok megalapozásának magyar eredete elismert.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének eredményeként ma Magyarország az EU új tagállamai közül egyedül rendelkezik olyan tudományos nagyberendezéssel, amit az EU a működés részbeni finanszírozásával elismer.

Az űrelektronika, űrdozimetria területén elért eredmények a NASA, ESA révén hasznosulnak.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézetben található az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar Fizikai Kémia Tanszékének és a Veszprémi Egyetem Vegyészmérnöki Karának kihelyezett laboratóriuma.

Az intézet kutatói mind az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán, mind pedig a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Természettudományi Karán aktívan részt vesznek mind az alapoktatásban mind pedig a posztgraduális képzésben. Az ELTE-n az AEKI kutatói a vegyészet, ezen belül a fizikai kémia oktatásában tevékenykednek, a BMGE-n pedig a nukleáris technika, ezen belül elsősorban a reaktorfizika területén. Ez utóbbi területen a méréskiértékelés témakörében sikerült iskolát teremteni, aminek eredményei a gyakorlati életben is jelentősek.

Az AEKI egyik kutatója rendszeresen előadásokat tart a Central European University (CEU Budapest) egyetemen is.

Az intézet, kihasználva Magyarország OECD tagságát, több jelentős nemzetközi programban vett részt, amelyek közül legfontosabb a sok éve sikeresen folyó HALDEN projekt.

Nemzetközi kapcsolataik fontos részét képezi az EU finanszírozású projektekben való részvétel, tekintettel arra, hogy a 6. keretprogramban a reaktorbiztonság súlya rendkívül lecsökkent, e területen visszaesés tapasztalható. Kiterjedt nemzetközi kapcsolataik vannak számos kutatóintézetrel és egyetemmel, elsősorban Európában, de a tengerentúlon is.

Az intézet kutatási céljainak eléréséhez, a nemzetközi projektekben való részvétel miatt, de egyéb szempontokból is, jelentősen hozzájárultak a kutatók külföldi útjai. Az MTA kétoldalú egyezményes útjai különösen jelentős szerepet játszottak, hiszen pl. így sikerült Oroszországban a radioaktív hulladékok elhelyezésével kapcsolatban fontos információkhoz jutni. A TÉT kapcsolatok keretében megvalósult utak a saját finanszírozási utakhoz hasonlóan fontos együttműködésekhez adtak segítséget.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A hazai pályázatok közül az NKFP a legfontosabb az intézet szempontjából. Amint az a VI/b. táblázatból is látszik, a nyertes pályázatok tematikája szerteágazó, felöleli az intézet szinte minden kutatási területét. Az elnyert összegek is jelentősek, fontos hozzájárulást adtak az intézet kutatási céljainak megvalósulásához. Amint a VI/b. táblázat mutatja az OTKA nem játszik igazán jelentős szerepet az intézet életében. Igen jelentős az egyéb pályázatok szerepe, ezek azt bizonyítják, hogy az intézet eredményeinek gazdasági-társadalmi haszna mind az államigazgatás (OAH) mind az ipar (atomerőmű) területén nagy.

Az elnyert nemzetközi pályázatok zöme amint azt a VI/c táblázat mutatja az Európai Uniótól ered, ez öröndetes, mert azt bizonyítja, hogy az intézet már Magyarország csatlakozása előtt is jól be tudott kapcsolódni az európai tudományos életbe. Sajnálatos viszont, hogy az elnyert pályázatok zöme az 5. keretprogrambeli és relatíve kevés a 6. keretprogramon belüli. Ennek oka az EU politikája, ami a 6. keretprogramban a nukleáris témákat jelentősen korlátozta. Sajnos kevés remény van arra, hogy ez a tendencia a 7. keretprogramra megváltozzon. Az elnyert nemzetközi pályázatok összege jelentős, 2004-ben fontos hozzájárulást adott az intézet kutatási céljainak megvalósulásához.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Végh J, Major Cs, Pócs I, Kálya Z, Ignits M: Modernization of the VERONA core monitoring system at Paks NPP, 14th Symposium of AER, 13-17 September 2004, Espoo, Finland
2. Lipcsei S, Kiss S, Czibók T: A new generation of noise diagnostic data acquisition systems for Paks NPP, Proc. of the 4th International Topical Meeting on Nuclear Plant Instrumentation, Control and Human-Machine Interface Technologies (NPIC & HMIT 2004), 19-23 September 2004, Columbus (Ohio), USA

3. Sváb E, Mészáros Gy, Somogyvári Z, Balaskó M, Körösi F: Neutron Imaging of Zr-1% Nb Fuel Cladding Material Containing Hydrogen, *Applied Radiation and Isotopes*, 61 471-477 (2004)
4. Mayer G, Házi G, Imre AR, Kraska T, Yelash LV: Lattice Boltzmann simulation of vapour-liquid equilibrium on 3D finite lattice, *International Journal of Modern Physics C*, 15459-470 (2004)
5. Balaskó M, Jancsó G, Körösi F: Analyzing of segregation in mixtures of 3-methylpyridine and heavy water by dynamic neutron radiography. *Appl. Radiation and Isotopes* 61, 597 (2004)
6. Jancsó G: Are isotopic mixtures ideal? *Pure Appl. Chem.* 76, 11 (2004)
7. English A (AEA Didcot), Sevini F (JRC-IE), Langer R (Framatome ANP), Cowan J (BNFL), Brumovsky M (NRI), Gillemot F (AEKI), et al: „Phosphorus Influence on Steel Ageing” in FISA 2003 EU Research in Reactor Safety, EUR 21026, ed. by Van Goethem G, Zurita A, Casalta S, Manolatos P, pp. 107-113
8. Adroguer B, Chatelard P, Cocuauud N, Duriez C, van Dorsselare JP, Hózer Z, et al: Core Loss During a Severe Accident, in FISA 2003 EU Research in Reactor Safety, EUR 21026, ed. by Van Goethem G, Zurita A, Casalta S, Manolatos P, pp. 342-347
9. Langenbuch S, Krzykacz-Hausmann B, Schmidt K.-D, Hegyi G, Keresztúri A, Kliem S, Hadek J, Danilin S, Nikonov S, Kuchin A, Khalimanchuk V, Hämäläinen A: Comprehensive uncertainty and sensitivity analysis for coupled code calculations of VVER plant transients, *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 235, 2-4, pp. 521-540
10. Alföldy B, Balásházy I, Hofmann W: Optimal droplet size and breathing parameters for inhalation of therapeutic aerosols. Part I: Tracheobronchial deposition. *Journal of Aerosol Science*, 35(S1), S1209-S1210 (2004)
11. Osán J, Török S, Alföldy B, Falkenberg G: Characterization of anthropogenic sediment particles after a transboundary water pollution of River Tisza using synchrotron radiation, *Spectrochimica Acta Part B*; 59: 701-708, (2004)
12. Holmström H, Tóth I, Prasser H.-M, Kantee H, Elter J, Purhonen H, et al: (12): Improved Accident Management of VVER Nuclear Power Plants (IMPAM-VVER). Proc. of FISA-2003, EU Research in Reactor Safety, Luxembourg, November 10-13, 2003. Proc. Edited by G. van Goethem et al. EUR 21026. ISBN-92-894-7803-9. pp. 524-529
13. Szabados L: Integral Thermal-Hydraulics Tests for Safety Evaluation of VVER-440/213 Nuclear Reactors and Code Validation. *Nuclear Technology*, Vol. 145, Jan. 2004. ISSN-0029-5450

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: KFKI Atomenergia Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	199	Ebből kutató ² :	94
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			22
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			129
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			112
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	63	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	5
nemzetközi együttműködés keretében:	60	SCI által regisztrált folyóiratban:	47
összesített impakt faktor:	63,394	összes hivatkozás száma ⁴ :	161
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			107
Megjelent könyv:	1	könyvfejezet:	4
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	3	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	75	poszterek száma ⁶ :	24
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:		658,1 MFt	
Beruházási támogatás:	10,3 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	5
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		4,2 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			5
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	37,0 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			25
EU forrásból:	19	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	128,4 MFt
Egyéb:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30,3 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			44
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		1092,0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			337,2 MFt

KFKI RÉSZECSCKE- ÉS MAGFIZIKAI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest Konkoly-Thege Miklós út 29-33, 1525 Budapest Pf. 49.

Telefon: 392-2512, Fax: 392-2598,

e-mail: sznagy@rmki.kfki.hu, honlap: www.rmki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet a beszámolási időszakban alapító okiratában rögzített feladatainak megfelelően eredményes kísérleti és elméleti tudományos alapkutató munkát végzett a magfizika, a részecskefizika, a plazmafizika, a hűtött atomok fizikája, az űrfizika, a nukleáris szilárdtestfizika, a nukleáris anyagtudomány és a fizika biológiai alkalmazásai területén. Fejlesztési tevékenységének területei: lézerfizika, nukleáris analitika, űrtechnika, gyors adatfeldolgozás, spektroszkópia, speciális elektronikus, mechanikai és információtechnológiai eszközök, szoftverfejlesztés. Működtette nagyberendezéseit, az EG-2R és a NIK gyorsítókat, valamint a kutatást és a kapcsolatokat szolgáló számítógépes hálózatot. A KFKI telephelyen kialakított megállapodásoknak megfelelően felügyelte a telephelyi számítástechnikai hálózat üzemeltetését is. Az elmúlt évben kiépített 100 processzorból álló CERN LHC-Grid rendszert a CERN működő Tier-2 csomópontnak ismerte el, és az MGKK támogatásával az RMKI megszerezte az EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication) szervezettől a GRID Certificate Authority (CA) jogot az egész magyar Grid kutatói közösség számára. A brookhaveni RHIC PHENIX kísérlethez is kiépítettek egy hasonló, 38 processzoros rendszert. Tudományos kutatómunkára alkalmas, "üzemszerű" állapotba hozták Magyarország első, az előző évben telepített molekulanyaláb-epitaxiás, ultranagy vákuumú vékonyréteg-növesztő berendezését.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion fizika.

A témán dolgozó fizikusok helyzetét meghatározza, hogy két jelentős CERN-beli kísérletben (LEP, NA49) az adatok gyűjtése és azok jelentős részének a feldolgozása befejeződött. Ugyanakkor igen hangsúlyossá vált a 2007-ben induló Large Hadron Collider (LHC) kísérleteire való felkészülés.

A kvark-gluon-plazma témakörében lényeges fordulatot hozott az NA49 kollaboráció azon fontos felismerése, hogy a fázistérben, hasonlóan a közönséges víz esetéhez, van egy kritikus pont, amely alatt csak ún. "cross over", vagyis sima átmenet van, és csak afelett lép fel fázisátmenet. Ezzel teljesen új megvilágításba kerültek az NA49 kísérlet 20 és 160 AGeV közötti laboratóriumi energiatartományban végzett mérései, melyek folytatását most már a CERN SPS Bizottsága is határozottan támogatja. Az NA49 kollaborációban 120-an dolgoznak, az RMKI-ből 12 résztvevő van, akik 20 Mft intézeti és 10 Mft OTKA támogatást használtak fel.

Az LHC CMS kísérlet építése kapcsán eredményesen befejeződött az RMKI által végzett munka a HF kvarc-szálas kaloriméteren, és jelentős haladást értek el a müon kamrák automatikus pozicionáló ("alignment") rendszerének fejlesztésében. Az RMKI kutatói bekapcsolódtak a kísérlet nehézion programjának az előkészítésébe. Installálták és futtatták a CMS detektor szimulációs és rekonstrukciós szoftvereit, egyben tesztelték a helyi LCG-2 grid rendszert is. A készülő LHC ALICE kísérletben az adatgyűjtő rendszer részét alkotó Detector Data Link (DDL) fejlesztési programja keretében elvégezték a hálózati kártyák besugárzási tesztjeit, melyek alapján megkezdték a sugárzás következtében fellépő konfigurációvesztéssel szemben védett verzió tervezését. Az LHC kísérletekben 2-3000 aktív résztvevővel számolnak, ebből jelenleg 15 magyar. Az NKTH évi 300 kCHF támogatást adott a konstrukciós költségekhez, az EU-tól az FP-6 keretprogram révén 10 kEUR pályázati pénzt sikerült elnyerni. Az intézet támogatás 24 MFt volt.

2004-ben befejeződött az olaszországi Borexino-detektor építése és elkezdődött az alacsonyenergiájú ($E < 1$ MeV) napneutrínók mérése, különös tekintettel a ${}^7\text{Be}$ -neutrínókra. A Borexino teszt-detektorával (CTF) új kísérleti határokat adtak a Pauli-elv lehetséges sérülésére, a tiltott ${}^{12}\text{C} \rightarrow {}^{12}\text{C} + \gamma$ átmenet bomlási idejére 21×10^{27} év minimális értéket nyertek. A nemzetközi kollaboráció kb. 100 tagot számlál, melyből 3 az RMKI-s résztvevő, 5 MFt intézeti támogatással.

A hadronkeltés fenomenológiai analízise során a kvantumstatistikai korrelációk tulajdonságait vizsgálták Lévy-stabil típusú forráseloszlások megjelenése esetén. Kísérletet tettek a hadronikus forrás alakjának és a QCD partonzáporok statisztikus tulajdonságainak (pl. fraktáldimenzió) együttes leírására a Lund modell keretében.

A FOPI detektorrendszer felújítása során elkészült az RPC detektorok tartószerkezete. Széles tömegszám tartományban (C, Al, Cu, Sn, Pb) megmérték a $\pi + A \rightarrow K + \Lambda$ reakció hatáskeresztmetszetét. A kooperációban résztvevő 51 kutató közülük 3 az RMKI munkatársa, akik 10 MFt intézeti és 2,155 MFt OTKA pályázati forrást használtak fel.

Újabb nagyságrendet javítottak az antiproton tömegének és töltésének meghatározási pontosságán, ami fontos kísérleti próbája az anyag-antianyag szimmetriának. Csatorna-hatást találtak az antiprotonos héliumatomok idegen atomokkal történő ütközésekor. Ezeket az eredményeket 10 kutató érte el (ebből 2 RMKI-s) 4,2 MFt intézeti és 2,1 MFt hazai pályázati forrás felhasználásával.

Tovább folytatódott a nehézion ütközések kísérleti vizsgálata RHIC energián. Kiértékeltek a 200 GeV-es d+Au reakciókban mért kísérleti adatokat. Sikerült az előre és a hátraszórás tartományokban meghatározni különböző részecskék hozamát. A d+Au mérésekben aktív szerepet vállaltak a PHENIX-Magyarország tagjai. A munkacsoport 10 magyar tagja közül 4 RMKI-s, a PHENIX-ben összesen kb. 500-an vannak. A 2004-ben a kutatásra fordított összeg mintegy 5 millió Ft volt, mely nagyobb részben OTKA, kisebb részben MTA-NSF támogatás volt.

Anyagtudomány kísérleti magfizikai módszerekkel

Az anyagtudományi témacsoport feladata az volt, hogy elsősorban magfizikai módszerekkel kísérleti alap kutatásokat végezzen az anyagtudomány területén és fejlessze az ehhez

szükséges kísérleti és elméleti háttérrel. A Magfizikai Főosztályon a Biofizikai Osztály, illetve az MFA feladataihoz is kapcsolódóan üzemeltették az 5 MV-os EG-2R Van de Graaff iongyorsítót, illetve a rekonstrukció áprilisi megkezdéséig a NIK nehézion-implantert.

A 2004-es év a 2003-ban beszerzett és telepített molekulanyaláb-epitaxia (MBE) vékonyréteg-növesztő berendezés üzemszerű működésbe állításának éve volt. A készülék a szerződésben specifikált paramétereket 2004 novemberére érte el. Az év során összesen 44 minta készült, nagy részük tesztminta volt, melyek minősítése az EG-2R gyorsító mellett RBS módszerrel történt.

Meghatározták Ar-O₂ keverékben a mikroelektronikai eszközökben extrém körülmények között is használható SiC magas hőmérsékleti oxidációs kinetikáját. A poláros SiC kristály mindkét oldalán kezdetben a felület tulajdonságai, vastagabb rétegek kialakulása után pedig a diffúzió határozza meg az oxidáció menetét. Ellipszometria és RBS együttes használatával megmutatták, hogy a SiC/SiO₂ határfelületen egy köztes réteg helyezkedik el, melynek sűrűsége és optikai törésmutatója a két oldalon különböző. RBS-sel meghatározták változóan alacsony, illetve nagy porozitású multiréteges porózus szilícium porozitását. Sikerült jó minőségű 58% és 70% porozitású rétegekből olyan multiréteget létrehozniuk, ami optikai eszközökben is alkalmas lehet interferencia szűrőnek. A fenti eredményeket 13 kutató érte el (ebből 5 RMKI-s) 10 MFt intézeti és 2 MFt pályázati forrás felhasználásával.

Ionimplantációval és lézeres hőkezeléssel kialakított vasszilicideken fázisanalízist végeztek abból a célból, hogy az adatokkal megkönnyítsék a félvezető-technikában igen fontos β -FeSi₂ réteg Si felületén történő epitaxiális növesztését. Alacsony hőmérsékleten végzett konverziós elektron Mössbauer-spektroszkópiával meghatározták ezüst felületeken MBE-vel növesztett 3–10 atomi vastagságú vasrétegek hiperfinom kölcsönhatásának mértékét, és ezáltal azonosították ennek az igen vékony rétegnek a mágneses szerkezetét. Megmérték az élettudományi és orvosi alkalmazások számára is fontos nanomagnetit hiperfinom terét a hőmérséklet függvényében, amiből ezen anyag összetételére és szerkezetére, valamint abban a mágnesség kialakulásának mechanizmusára következtettek. Kifejlesztettek egy alacsony hőmérsékleten működő konverziós elektron detektort. Az eredményeket 7 kutató érte el (mind RMKI-s) 15 MFt intézeti és 2 MFt pályázati forrás felhasználásával.

Súroló beesésű fotonok és neutronok diffúz szórásából következtetni lehet a mágneses adattárolásban és a mágneses szenzorikában fontos, antiferromágnesesen csatolt multirétegekben kialakuló, és ezen eszközök zaját befolyásoló domének méretére. Ebből a célból kidolgozták a diffúz szórás elméleti modelljét és annak alapján szimulációs programot készítettek. Elméleti megfontolásokra alapozva módszert dolgoztak ki a nukleárisan rezonáns fotonok komplex reflektivitási, illetve átviteli függvényének közvetlen, stroboszkópikus detektáláson alapuló fázishelyes mérésére. Elgondolásuk helyességét a SPring-8 szinkrotronforrásnál, Japánban elvégzett méréseikkel igazolták. Mind szinkrotronsugárzással, mind konverziós elektron Mössbauer-spektroszkópiával demonstrálták, hogy mágneses vékonyrétegekben a mágnessétség előjele közvetlenül meghatározható. A fenti eredményeket 15 kutató érte el (ebből 8 RMKI-s) 25 MFt intézeti és 12 MFt pályázati forrás felhasználásával.

A katalizátorok és a sugárzó hulladékok tárolása szempontjából fontos zeolitokban igazolták, hogy mezopórusos mintákban a belső csatornák mentén a fal vékony rétegében keletkezett pozitronium az úgynevezett szabad térfogatban telítési szinten befogódik, miközben a hibahelyek is pozitroniumbefogó-centrumokat jelentenek, ami a befogó centrum környezetének

vizsgálatára egyedülálló lehetőséget ad. Folytatták a nagyenergiás Kr- és Bi-ionokkal besugárzott Si-minták vizsgálatát; ennek során a pozitronannihilációs technika különféle változatait alkalmazva megállapították, hogy a divakancia-képződés képződési energiája az elméletileg vártnál lényegesen alacsonyabb. Továbbfejlesztették az RMKI-ban épített és próbaüzemben már használható első hazai lassúpozitron-generátort. A fenti eredményeket 7 kutató érte el (ebből 2 RMKI-s) 10 MFt intézeti és 2 MFt pályázati forrás felhasználásával.

Elméleti fizika

Az év kiemelkedő kutatási eredménye a mágneses monopólus végtelen sok gerjesztési állapotának (kvázi-normálmódusainak) fölfedezése és kollektív hatásuk kiszámítása volt. A kutatók kifejlesztettek egy olyan általános numerikus módszert, amelynek segítségével különféle általános hiperbolikus fejlődési egyenleteknek eleget tevő anyagmezők gömbszimmetriát megtartó időfejlődésének vizsgálatát tudták elvégezni. A számolásokkal meghatározható volt mind a központi régió dinamikája, mind pedig a végtelenbe kisugárzott energia mértéke. Módszerükkel tanulmányozhatóvá vált az erősen deformált SU(2) *Bogomolny-Prasad-Sommerfield* (BPS) mágneses monopólusok időfejlődése. A numerikus szimulációban a gömbszimmetrikus tartomány központi részén egy hosszú élettartamú „lélegző” állapot alakult ki, a távoli tartományban pedig egy nagyfrekvenciás oszcillációkból felépülő, önhasonlóan táguló stabil héj-struktúra jelent meg. A témával az RMKI 3 kutatója foglalkozott, évi 10 MFt saját, 3 MFt OTKA és 1 MFt NATO ráfordítással.

A 200 GeV tömegközépponti ütközési energiával keltett deutérium+arany reakciók kísérleti adatainak elméleti értelmezése során 2004-ben az előre és a hátraszórási tartományokban mért adatok elemzését végezték el perturbatív kvantumszindinamikán alapuló modell alkalmazásával. A modell az előreszórási (Au-oldal) tartományban továbbra is sikeresen működött, a visszaszórási tartományban azonban már komoly eltérések adódtak a kísérleti eredmények és az elméleti számolások között, ezért megkezdték az atommagokhoz kapcsolódó módosított paron eloszlásfüggvények viselkedésének tisztázását az “anti-shadowing” tartományban. A témával az RMKI 3 kutatója foglalkozott, 10 MFt RMKI, 2 MFt OTKA és 1 MFt MTA-NSF támogatás ráfordításával.

Egy kvantumtérelmélet szuperszelekciós szimmetriájának leírása során a fizikai adatokhoz egy kvantum csoport, illetve általánosabban egy Hopf algebroid (ú.n. „quantum groupoid”) rendelhető hozzá. Így a fizikai adatok megfelelnek a megfigyelhető mennyiségek algebrájának a téralgebrába való beágyazásának. Az ilyen, kettes mélységű algebra-kiterjesztések vizsgálata során úgy sikerült definiálni a Hopf algebroid fogalmát, hogy számos, Hopf algebrákra vonatkozó klasszikus eredmény kiterjeszhetővé vált Hopf algebroidokra is. A Hopf algebroidok szerkezete és fizikai nézőpontból fontos ábrázolás-elmélete jól jellemezhető az integrálszerkezet segítségével. A kérdés vizsgálata során született eredmények szükséges és elégséges feltételeket fogalmaznak meg egy Hopf algebroid félegyszerű, illetve Frobenius voltára. Az utóbbi kérdés különösen fontos, mivel az ilyen Hopf algebroidok tekinthetők a fizikában szokásos kompakt szimmetria-csoportok megfelelőinek. A témával az RMKI 2 kutatója foglalkozott évi 12 MFt saját és 2,4 MFt OTKA ráfordítással.

A kvantumelmélet két modern alkalmazási területén is fontos eredmények születtek. Egyrészt a kvantum-gravitáció és a kvantum-kozmológia Gell-Mann-Hartle-típusú dekoherencia-elméleteire olyan új, fontos megszorítást találtak, amelyet eddig figyelmen kívül hagytak a

terület művelői, másrészt kvantuminformációs elméleti kutatásokban kimutatták, hogy a háromelemű összetett rendszer hullámfüggvénye rekonstruálható a kételemű redukált állapotokra vonatkozó információból. A témával az RMKI 1 kutatója foglalkozott és a kutatás 6 MFt saját intézeti ráfordítást kapott.

Plazmafizika

A mágnesesen összetartott plazmákban történő termonukleáris fúzió megvalósításához kapcsolódó kutatás a következő területeken folyt: méréseket végeztek tokamakokban előállított forró plazma tulajdonságainak megállapítására atomnyalábok segítségével, vizsgálták a plazmába lőtt pelletek (kis szilárd anyagdarabok) és a plazma kölcsönhatását, és a plazma turbulenciáit. A kísérleteket európai nagyberendezéseken, az EURATOM koordinálásával és támogatásával végezték.

Elkészítették egy újfajta ionforrás mintapéldányát, amely az eddig alkalmazott forrásoknál 2-3-szor nagyobb ionáramot szolgáltat. A forrást sikeresen tesztelték a garchingi plazmafizikai intézetben felépített lítium diagnosztikai nyalábban. A garchingi ASDEX Upgrade tokamakon megmérték a pellet körül kialakuló felhő mozgását a plazmában, és orosz-magyar együttműködésben elméletileg értelmezték az eredményeket. Kísérleteket folytattak az úgynevezett ELM instabilitások pellet belövással történő szabályozott kiváltására. Számításokat végeztek az ELM-ek szabályzásának lehetőségére a tervezett nemzetközi ITER tokamak kísérletben. Kifejlesztettek egy kisméretű, fagyasztott deutérium pelleteket nagy ismétlési sebességgel belövő injektort. A prágai CASTOR tokamakon Langmuir szonda sorozatok segítségével észlelték a plazma áramlási sebesség ingadozásait. A Wendelstein 7-AS stellarátoron végzett mérések analíziséből megállapították, hogy a plazma paramétereiben olyan tranziens változások láthatók, amelyek a plazma hővezetési tulajdonságaitól függenek, így fontosak a hővesztési folyamatok megértéséhez.

A tokamak plazma diagnosztikai témákban az RMKI-ből 7 minősített kutató, 3 PhD hallgató és 5 diplomamunkás vett részt. A külföldi nagyberendezéseken (TCV, TEXTOR, ASDEX-UPGRADE, JET) általában több száz kutató együttes munkájával végzik el a feladatokat, azonban a magyar részvétellel történő mérések kisebb csoportokban folytak, a magyar kutatók részaránya 50%. A hazai ráfordítás 60 MFt, a kísérletek különböző EURATOM pályázati pénzek 85 MFt támogatásával folytak. Ezek a kutatások megalapozzák Magyarország részvételét a világ kutatóinak összefogásával készülő ITER kísérleti fúziós reaktor programban.

Lézerrel keltett plazmákban nagy intenzitású ultraibolya lézerimpulzussal megvizsgálták magas harmonikusok keltését, tulajdonságait és terjedését különböző targeteken. Megállapították, hogy 10^{16} W/cm² intenzitás felett a harmonikusok terjedésének tulajdonságai megváltoznak, és polarizációjuk sem őrzi tovább a fókuszált lézerfény polarizációját, kevertté válik. Megállapították, hogy a jelenséget a kritikus felület fodrozódása okozza, melyet figyelembe kell venni, ha a rövid lézerimpulzusokat a lézerfúzió gyors begyűjtására alkalmazzák. A Max-Planck-Institut für Quantenoptik intézetben végzett kísérletekkel bebizonyították, hogy az ultraintenzív lézerfény az előplazmában relativisztikus önfókuszálás után gyorsítja fel az elektronokat több MeV energiára. A varsói Katonai Akadémia Műszaki Egyetemével együttműködve az általuk kifejlesztett röntgen árnyképfelvételes módszerrel karakterizálták „gáz jet” targetüket. A munkában az RMKI-ből 1 minősített kutató és egy PhD hallgató vett részt. A témát az OTKA 2,5 MFt-tal, az EURATOM 6 MFt-tal, a NAÜ 3 MFt-tal támogatta, az RMKI ráfordítás 12 MFt volt.

A lézersugárzás és atomi rendszerek kölcsönhatását rubídium atomsugár lézeres módszerrel lelassított és csapdában tárolt, μK hőmérsékletű atomjaival tanulmányozták. Az atomok mozgásállapotának megváltoztatására irányuló kísérleteikben adiabatikus kölcsönhatást valósítottak meg az atomok és a megvilágító fény között. Olyan frekvenciamodulált lézerimpulzusokat állítottak elő, amelyeknél az egymással szemben haladó impulzuspárral való kölcsönhatás során az atomoknak átadott egyirányú impulzusmomentum nagyobb, mint egyes impulzusok esetében, s elméleti vizsgálataikkal bebizonyították, hogy egyetlen, frekvenciamodulált lézerimpulzussal két alapállapot sötét szuperpozícióját lehet előállítani Λ -atomban, elegendően nagy Rabi-frekvenciák esetében pedig abszorpciómentes terjedés, azaz elektromágnesesen indukált ön-átlátszóság valósítható meg. A kutatómunkát 7 MFt OTKA és 1 MFt NKFP támogatással végezték hat minősített kutató, egy PhD hallgató és egy diplomamunkás részvételével. Az RMKI anyagi ráfordítása 36 MFt volt.

Űrfizika

Az ESA *Rosetta-Philae* űrszonda-párosa (az orbiter és a leszállóegység) 2004. március 2-án indult a Csurjumov-Geraszimenko üstökös felé. Az orbiter egyik műszere (RPC) az üstökös plazmakörnyezetét vizsgálja. Az RMKI munkatársai az RPC fedélzeti adatgyűjtője és földi ellenőrző egységének elkészítésében vettek részt. Magyar-német-finn együttműködésben elkészítették a Philae leszállóegység fedélzeti számítógépét. A Rosetta szonda pályára állása után az első bekapcsoláskor a telemetria a fedélzeti berendezések normális működőképességéről adott információt. Részt vettek az üzembehelyezési tesztekben, a leszállóegység minden műszerének ellenőrzését számítógépük megfelelően kezelte. A projekt vezetése részéről definiált új hibaállapotok kezelésére új szoftver változatot készítettek az SGF Kft-vel közösen, és azt sikeresen „fellőtték” az egyre távolodó űrszondán lévő leszállóegység központi számítógépébe. Az új szoftver változatot már tesztelték, és a kapott eredmények alapján megállapítható, hogy az sikeresen működik. A feladatok megoldásában 5 fő vett részt 50 kEUR pályázati támogatással.

A NASA *Cassini* űrszondája 2004. június 30-án állt a Szaturnusz körüli pályára. Az intézet munkatársai a MAG és CAPS műszerek építésében vettek részt. A MAG műszer azonosította a Szaturnusz környezetében a fejhullám és magnetopauza átmeneteket. Az eredményeket összehasonlították a Voyager-1 szonda 23 évvel korábban végzett megfigyeléseivel, és megállapították, hogy a Szaturnusz külső plazmakörnyezete rövid és hosszúidejű skálán egyaránt dinamikusan változik. A CAPS műszer a Szaturnusz belső magnetoszférájának fizikai és kémiai komplexitását figyelte meg. Különösen érdekesek a gyűrűk közelében végzett azon mérések, melyek az ionok és molekulák közötti kémiai folyamatokra világítanak rá. A Titán plazmakörnyezetében végzett mérések tudományos feldolgozásába is aktívan bekapcsolódtak. Az eredmények közül kiemelendő, hogy a 2004. október 26-i megközelítés során a világon először sikerült méréseket végezni a Titán ionoszférájában; megállapították, hogy az ionoszféra meglehetősen éles határral rendelkezik. Feltárták a Titán plazmakörnyezetének alapvető jellemzőit, ezeket a második, december 13-i megközelítés megerősítette. Modellszámítást végeztek a Titán plazmakörnyezetében létrejövő hullámkeltési mechanizmusokra. Megvizsgálták az ionoszférikus eredetű és a köpenyben áramló plazma kölcsönhatását, és azt találták, hogy kétféle hullámkeltési folyamat jöhet létre. Meghatározták, hogy a kétféle hullám a Titán plazmaköpenyének mely tartományaiban várható. A Szaturnusz E porgyűrűjének vizsgálatához teljes háromdimenziós modellt fejlesztettek ki, amely a fényesség- és porsűrűség-eloszlások évszakos változásait is leírja. A modell paraméterei a Cassini

mérések friss eredményeinek segítségével tovább finomíthatók. A modell támogatja a Cassini pordetektora méréseinek tudományos értelmezését. Különösen fontos, hogy segítségével azonosíthatók azok a holdak, ahonnan a porrészecskék többsége származik. Ennek alapján a porrészecskék kémiai összetételének megméréseivel a holdak felszínének összetételére lehet következtetni. A eredményeket 3 kutató érte el 4 MFt pályázati támogatással.

A Föld magnetoszférájának vizsgálata kapcsán az RMKI részt vesz az ESA *Cluster* programjában, amelynek célja a földkörüli plazma kisléptékű tulajdonságainak tanulmányozása. A négy egyformán felszerelt műhold segítségével lehetővé vált a magnetoszférikus és a napszél eredetű plazma térbeli és időbeli változásainak szétválasztása és háromdimenziós vizsgálata. Megvizsgálták a *RAPID* műszer által mért közepes energiájú ionok fluxusának változásait forró plazmával töltött mágneses üregekben, azaz „hot flow” anomáliák idején, melyeket a napszél hirtelen lefékeződése és elfordulása, felforrósodása, ill. a mágneses tér lecsökkenése és körbefordulása jellemez. A magyarázatok szerint a fejhullám és a bolygóközi térben terjedő tangenciális diszkontinuitás kölcsönhatásáról van szó. A 2003. év tavaszán egy 2 hónapos időszakban mintegy 50 eseményt találtak, és kettőt részletesen elemeztek. Az eredményeket 3 fős kutatócsoport érte el 40 kEUR támogatással.

Az ESA-NASA *Ulysses* szonda eddigi, immár több mint egy teljes napciklust lefedő megfigyeléseinek alapján vizsgálták a helioszférikus mágneses tér fluktuációit, és azoknak hatását a töltött részecskék terjedésére. Megállapították, hogy a mágneses tér fluktuációiból számított átlagos úthossz, amelyet a részecskék szóródások nélkül megtesznek, alapvetően a napszél sebességétől függ. Rámutattak arra, hogy ez a függés a részecskefluxus napciklus szerinti modulációjához fontos járulékot adhat. Korábbi megfigyelések alapján ugyanis nyilvánvalóvá vált, hogy a sarki koronalyukak, amelyek a gyors napszél forrását képezik, a napciklus nyugodt fázisában kiterjednek a Nap egyenlítője felé, olykor el is érik azt. A témán 1 fő dolgozott 2 MFt támogatással. Az RMKI kutatóin kívül az űrmissziókon dolgozó nemzetközi kutatócsoportok létszáma mindegyik esetben százas nagyságrendű.

Biofizika

A hippocampus az agy egy olyan központi területe, amely a tanulási és az érzelmi folyamatok szabályozásában egyaránt fontos szerepet játszik. Működésére jellemzőek a populációs oszcillációk, elsősorban a lassúbb, ún. theta, illetve a gyorsabb, ún. gamma frekvenciasávban. Összefüggés figyelhető meg a kísérleti állat érzelmi változásai és a hippocampus oszcillációs aktivitása között és ezt az oszcillációt számos antidepresszáns gyógyszer is befolyásolja. Munkájuk célja az volt, hogy számítógépes modellek segítségével vizsgálhatóvá tegyék és megjósolják bizonyos gyógyszerek hatását a rendszer viselkedésére, jelen esetben a hippocampális oszcillációkra és így segítséget nyújthassanak olyan gyógyszerészeti kutatásokhoz, melyeknek specifikus, kevés mellékhatással bíró antidepresszáns és stresszoldó gyógyszerek kidolgozása a célja. Munkájuk során elkészítették a hippocampus neuronhálózatainak részletes, egysejt modellekre épülő, biológiailag realiztikus számítógépes modelljét. A modell alapján leírták a hippocampális theta és hozzá csatolt gamma oszcilláció létrejöttének valószínű mechanizmusát és reprodukálták számos ismert vegyület populációs aktivitás-mintázat módosító hatását. A modell alapján kijelölték, hogy a neurális kapcsolatrendszer mely elemének specifikus módosításával lehet a leghatékonyabban befolyásolni a hálózat aktivitását, irányt mutatva új gyógyszerek fejlesztéséhez. Ez az új kutatási stratégia fordulatot jelent ezen a kifejezetten elméleti természetű kutatási területen,

mivel elérhető közelségbe hozza a tudományos eredmények közvetlen gazdasági, társadalmi hasznosítását. A fenti eredményeket 6 kutató érte el, ebből 4 RMKI dolgozó, 2,5 MFt OTKA és 10000 USD külföldi támogatással (Pfizer Inc.).

A nukleáris analitikai csoport a Magfizikai Főosztály munkatársaival együtt továbbfejlesztette a 2,5 MeV energiájú proton mikronyaláb ion-optikai rendszerét, és tovább javította a legfontosabb nyaláb-paramétereket. Optimalták a steering mágnesek helyzetét, digitális vezérlésre tértek az utolsó, még analóg táplálású kvadrupol mágneseknél, megnövelték a végső fókuszálást végző mágnes rendszer tehetetlen tömegét. Ezen erőfeszítések eredményeképpen a végső nyalábot 400-500 pA protonáram mellett sikerült 1,1 μm x 2,2 μm folt méretűre szűkíteni. Első alkalmazásokként elemeloszlási térképeket vettek fel savhatásnak mesterségesen kitett cement mintákon és környezeti szennyeződés nyomon követésére is alkalmas hal hallócsont-metszeteken. Az eredményeket 4 fős kutatócsoport érte el 20 MFt saját ráfordítás mellett 2 MFt OTKA pályázati támogatással.

Informatika, e-tudomány (e-science)

Az RMKI kutatói Magyarországon elsőként csatlakoztak a CERN LHC Computing Grid (LCG) hálózatához, a 2003-ban üzembehelyezett, 100 processzorból álló Tier-2 szintű rendszeren 2004-től részt vesznek az LCG szoftver tesztelésében, közreműködtek az LCG-rendszer telepítésében a SZTAKI és az ELTE kutatócsoportjainál. Az RMKI megszerezte az EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication) szervezettől a GRID Certificate Authority (CA) jogot az egész magyar Grid kutatói közösség számára. Meghonosítottak és sikeresen futtattak a Grid-rendszeren biológiai és gravitációelméleti alkalmazásokat. Felállítottak egy, a RHIC PHENIX kísérletéhez csatlakozó, 38 processzorból álló klaszter-rendszert is. Az eredményeket az RMKI 9 kutatója érte el 12,5 MFt intézeti és 4,4 MFt hazai pályázati forrás felhasználásával.

A számítógéphálózat biztonságának fejlesztése érdekében elkészítették a SecureFilter LINUX netfilter/iptables alapú tűzfal szoftvert, valamint a felhasználók által konfigurálható Postfilter spamszűrési szoftvert, és átadták a hazai kutatói közösségnek. A fejlesztésen 3 kutató dolgozott, az NIIF (Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Iroda) a munkát 3-3 MFt-tal támogatta a SecureFilter és Postfilter projektek keretében.

A Veszprémi Egyetemen együttműködve elkészítették a vakok és látássérültek számára használható „beszélő Braille tábla” (Slate Talker) prototípusát, melyhez az IHM 4,8 MFt pályázati támogatást adott. A fejlesztésben 3 RMKI kutató vett részt 18 MFt intézeti forrással.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az akadémiai intézetek közül az ATOMKI-val a részecskefizikai és a magfizikai módszerekkel végzett anyagtudományi kutatásokban erős az együttműködés. Az utóbbi területen fontos hazai partnere a Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet, a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet, a KK KI, továbbá az ELTE TTK is.

Az intézet 29 munkatársa tartott kötelező és speciális előadásokat, vezetett gyakorlatokat az ELTE, a BMGE, a Pécsi Tudományegyetem, a Szegedi Tudományegyetem, a Debreceni

Egyetem és a Szent István Egyetem tanszékein. A felsorolt egyetemekkel érdemi kutatási együttműködés is folyt. Az RMKI több laboratóriumában az ELTE hallgatói végeznek gyakorlatokat. Folytatta tevékenységét az OTKA által támogatott Gravitációs Tudományos Iskola. Jelenleg 15 doktori (PhD.) értekezés készül RMKI-s témavezető irányításával.

Az RMKI-ban szinte minden téma kutatása nemzetközi keretekben folyik, a legfontosabb szálak a CERN-hez kapcsolódnak. Hasonlóan létfontosságúak az űrfizikai kapcsolatok (ESA, NASA). Eredményes a kapcsolat számos nemzetközi és nemzeti intézménnyel. A nemzetközi trendekkel összhangban egyre nagyobb szerepet kapnak a külföldi, elsősorban európai nagyberendezések (szinkrotronok, iongyorsítók, neutronforrások, tokamakok, sztellarátorok) mellett végzett néhány napos mérések. Az együttműködő partnerek felsorolása meghaladja a beszámoló kereteit, jellemző példa, hogy az űrfizikában mintegy 30, az anyagtudományi kutatásokban 15 külföldi intézettel folytatnak közös kutatómunkát.

A részecskefizikusok részt vesznek a CERN-nél végzett korábbi mérések adatainak feldolgozásában és az épülő új részecskegyorsító, az LHC tervezett kísérleteinek előkészítésében. Darmstadtban bekapcsolódtak a 2012-re felépülő részecskegyorsító egyik kísérletének az előkészítésébe. Az RMKI koordinálja az RMKI, az ELTE és a Debreceni Egyetem részvételével a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium (USA) Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjénél (RHIC) működő PHENIX kísérleti együttműködést. Az RMKI tagja az MGKK-nak (Magyar Grid Kompetencia Központ), illetve résztvevője az EGEE projektnek (Enabling Grids for E-science).

Az RMKI fúziós csoportja a magyar EURATOM Association irányítója, fontos koordinációs munkát végez más intézmények (KFKI AEKI, BMGE, ELTE, MFA) által végzett fúziós technológiai kutatások érdekében. Az Európai Közös Tokamakon (JET) végzett munkában a lítium nyaláb diagnosztika felelőse a magyar csoport. Bekapcsolódtak a világ tervezett első fúziós reaktora, az ITER tervezési munkáiba is.

Az RMKI munkatársai aktívan részt vesznek a hazai és a nemzetközi tudományos közéletben, tisztségviselői vagy tagjai nemzetközi tudományos szervezeteknek, bizottságoknak. Legfontosabbak ezek közül a CERN Tanácsa és bizottságai, az Európai Fizikai Társulat (EPS), IAA (Board of Trustees), Rosetta Lander Steering Committee, COSPAR, COST Technical Committee for Physics, COST Action Management Committees, IAF Külügyi Bizottsága, IAA International Space Science Committee, a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA) szakértői bizottságai, European Neural Network Society Executive Committee. Többen tagjai nemzetközi folyóiratok szerkesztő- vagy tanácsadó bizottságának, nemzetközi konferenciák tanácsadó vagy programbizottságának, illetve állandó referensei nemzetközi folyóiratoknak. Az RMKI kutatói tagjai, tisztségviselői az MTA szakmai testületeinek, a hazai űrkutatás irányító testületeinek (Magyar Űrkutatási Tanács, Űrkutatási Tudományos Tanács), a MTESZ tudományos egyesületeinek (elsősorban ELFT és MANT). Az intézet munkatársai rendszeresen felkért tagjai a felsőoktatási habilitációs bizottságoknak és doktori tanácsoknak.

Az RMKI munkatársai a Cseh Tudományos Akadémia által működtetett CASTOR tokamaknál (Prága) 2004 júniusában a CASTOR munkatársaival közösen ismét megrendezték a "SUMTRAIC" nyári iskolát, melyen több magyarországi és külföldi hallgatónak is lehetősége nyílt arra, hogy egy kis tokamakon végezzen kísérleteket. 2004 áprilisában a

nemzetközi kapcsolatok bővítése céljából rendezték meg a II. Plazmafizikai Workshop-ot. A távmunka elterjesztését szolgálta a “Remote Participation Contacts Training and Budapest Workshop” nemzetközi rendezvény.

Az Elméleti Fizikai Főosztály kutatói márciusban “International Workshop on Hot and Dense Matter in Relativistic Heavy Ion Collisions” címmel, decemberben pedig “4th Winter School on Heavy Ion Physics” címmel rendeztek nemzetközi eszemecserét. Az antianyag-kutatás új eredményeit a “CPT Symmetry and Antiprotonic Atoms” szimpóziumon tekintették át Budapesten.

Az Európai Unió támogatásával az ERASMUS Intensive Programme keretében az ELTE-vel együtt rendezték meg Csillebércen a “Thin films as seen by the local probes” iskolát, amelyen az RMKI több kutatója tartott előadást a 10 országból érkezett 38 hallgatónak.

A “Workshop on Systems Neuroscience” című nemzetközi rendezvényen a számítógépes agykutatás új eredményeit elemezték.

Az MTA kétoldalú egyezményes és a Tét kapcsolatok általában más forrásból elő nem teremthető mobilitási támogatást jelentettek. Az Európai Unió sokszáz-fős multilaterális programjai mellett nagy szükség van a néhány főt megmozgató kétoldalú együttműködésekre, további fenntartásuk fontos érdek. Az RMKI munkatársai az MTA és a Cseh, Finn, Horvát, Lengyel, Orosz, Örmény, Ukrán Tudományos Akadémiák, az MTA és az Indiai Köztársaság kutatási csereprogramja keretében működtek együtt külföldi partnereikkel. Sajnálatos, hogy Magyarország EU csatlakozásával megszűnt az MTA és a svéd KVA és IVA közötti cserekapcsolat és a nagymúltú kapcsolatokban kényszerű szünet állt be. Az MTA által kezelt kétoldalú együttműködési pályázatoknál gyors és korrekt döntések születtek, az adminisztráció zökkenőmentes volt. Érdemes lenne tovább bővíteni a kétoldalú kapcsolatokat, többek között pl. Brazíliával és az USA Tudományos Akadémiájával. Az MTA együttműködésekhez hasonlóan fontos szerepet játszanak a Tét Alapítvány által kezelt kormányközi együttműködések is, az RMKI munkatársai flamand, japán, lengyel, orosz, portugál relációban éltek ezzel a lehetőséggel. A Portugáliába való kiutazást átmenetileg szüneteltetni kellett a portugáliai takarékosági intézkedések következtében.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az RMKI számára az intézet tevékenységének megfelelően továbbra is az OTKA pályázatai a legjelentősebbek, melyekhez a Tét együttműködések (magyar-orosz, magyar-flamand, magyar-német, magyar-japán, magyar-portugál, magyar-horvát) kiegészítő mobilitás-támogatást jelentenek. Hasonlóképpen fontos szerepet játszanak az MTA bilaterális együttműködési szerződésai.

Az RMKI a CERN által koordinált EU FP6 EGEE pályázat résztvevőjeként 2003-ban két évre 190 kEUR támogatást nyert el, a feladatok megvalósítása 2004-ben megkezdődött.

Hasonlóan sikeresen szerepelt az RMKI a DYNASINC pályázatban is, 120 kEUR támogatást nyerve el a lengyel koordinálású projektben, melynek munkái szintén 2004-ben indultak.

A GRID-témában elfogadott Marie Curie-pályázat - mely mintegy 440 kEUR teljes támogatást jelent - megvalósítása is 2004-ben indult.

Továbbra is eredményesen folytatódott a szabályozott termonukleáris fúziós kutatások összehangolására és finanszírozására irányuló EURATOM program, amely az egyeztetett kutatások hazai ráfordításait azok 1/3-ával egészíti ki. Az eredményes GVOP pályázat lehetővé teszi az infrastruktúra fejlesztését.

A tagállamok tagdíjaiból fenntartott európai szinkrotron kutatóközpont (ESFR, Grenoble) pályázati úton osztja szét a mérési időt és fizeti a „mobilitási költségeket”, ezt a tevékenységet a Magyar Szinkrotron Bizottság koordinálja. A korábban a CERN és az OM KFHÁ között kötött megállapodás alapján az NKTH továbbra is közvetlenül fizette a CERN-i kutatásokhoz szükséges költségek egy jelentős részét.

Az űrfizikai kutatások a Magyar Űrkutatási Iroda, az Európai Űrügynökség (ESA), a PRODEX és a TéT együttműködések pályázatai keretében kaptak támogatást a Rosetta, a Netlander, Cassini és a Cluster űrprogramokhoz.

EU pályázati támogatások segítségével az RMKI Számítástechnikai és Hálózati Központ munkatársai számítástechnikai segédeszközöket és szoftvert dolgoztak ki vakok és gyengénlátók számára.

Az RMKI a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Iroda „Videokonferencia Projektje” keretében elnyert lehetőségekre alapozva bekapcsolódott az országos videokonferencia rendszerbe, s 2004-ben a sokoldalú nemzetközi konferencia-kapcsolást is sikerült megvalósítani.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Alt C, Barna D, Csató P, Fodor Z, Hegyi S, Lévai P, Pála G, Siklér F, Szentpétery I, Sziklai J, Varga D, Vesztergombi Gy, Zimányi J, 99 *: Evidence for an exotic $S = -2$, $Q = -2$ baryon resonance in proton-proton collisions at the Cern Sps, Physical Review Letters, 92, 042003 (2004)
2. Diósi L: Anomalies of weakened decoherence criteria for quantum histories, Physical Review Letters, 92, 170401 (2004)
3. Achard P, Boldizsár L, Debreczeni J, Tóth J, Vesztergombi G, 361 *: Inclusive jet production in two-photon collisions at LEP, Physics Letters B, 602, 157-166 (2004)
4. Mack H O, Manno I, 100 *: New experimental limits on violation of the Pauli exclusion principle obtained with the Borexino Counting Test Facility, European Physical Journal C, 563, 23-34 (2004)
5. Csörgő T, Hegyi S, Zajc W: Bose-Einstein correlations for Levy stable source distribution, European Physical Journal C, 36, 67-78 (2004)
6. Yamaguchi H, Hayano R.S, Ishikawa T, Sakaguchi J, Widmann E, Eades J, Hori M, Torii HA, Juhász B, Horváth D, Yamazaki T: Systematic study of the decay rates of antiprotonic helium, Physical Review A, 70, 012501 (2004)
7. Stoicea G, Fodor Z, Kecskeméti J, Seres Z, 43 *: Azimuthal dependence of collective expansion for symmetric heavy-ion collisions, Physical Review Letters, 92, 72303 (2004)

8. Abbiendi G, Csilling A, Hajdu C, Horváth D, Pásztor G, 300 *: Tests of models of color reconnection and a search for glueballs using gluon jets with a rapidity gap, *European Physical Journal C*, 35, 293-312 (2004)
9. Tanczikó F, Deák L, Nagy DL, Bottyán L: Conversion electron Mössbauer spectroscopy with a linearly polarized source, *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, 226, 461-468 (2004)
10. Kajcsos Z, Duplatre G, Lizskay L, Lohonyai L, Varga L, Lázár K, Pál-Borbély G, Beyer HK, Paillaud JL: Positron annihilation and positronium trapping in zeolites, *Materials Science Forum*, 445-4, 239-243 (2004)
11. Fodor Gy, Rácz I: What does an excited 't Hooft-Polyakov magnetic monopole do? *Physical Review Letters*, 92, 151801 (2004)
12. Forgács P, Volkov MS: Resonant excitations of the 't Hooft-Polyakov monopole, *Physical Review Letters*, 92, 1518022 (2004)
13. Böhm G, Szlachányi K: Hopf algebroid symmetry of Abstract Frobenius extensions of depth 2, *Communications in Algebra*, 32, 4433-4464 (2004)
14. Barnaföldi GG, Papp G, Lévai P, Fai Gy: Cronin effect at different rapidities at RHIC, *Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics*, 30, s1125-s1128 (2004)
15. Adler S, Csörgő T, Hidas P, Ster A, Zimányi J, [PHENIX Coll.] x: Double helicity asymmetry in inclusive mid-rapidity π^0 production for polarized p+p collisions at $s^{1/2} = 200$ GeV, *Physical Review Letters*, 93, 202002 (2004)
16. Djotyan GP, Bakos JS, Sörlei Zs, Szigeti J: Coherent control of atomic quantum states by single frequency-chirped laser pulses, *Physical Review A*, 70, 063406 (2004)
17. Veres G, Kocsis G, Rácz E, Szatmári S: Doppler shift of femtosecond laser pulses from solid density plasmas, *Applied Physics B-Lasers and Optics*, 78, 635-638 (2004)
18. Bruchhausen M, Burhenn R, Endler M, Kocsis G, Pospieszczyk A, Zoletnik S: Fluctuation Measurements on the Wendelstein-7-AS Stellarator by means of repetitive Lithium Laser Blow-Off, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 46, 489 (2004)
19. Juhász A, Horányi M: Seasonal variations in Saturn's E-ring, *Geophysical Research Letters*, 31, CiteID L19703 (2004)
20. McComas DJ, Schwadron NA, Crary FJ, Elliott HA, Young DT, Gosling JT, Thomsen ME, Sittler E, Berthelier JJ, Szegő K, Coates AJ: The interstellar hydrogen shadow: Observations of interstellar pickup ions beyond Jupiter, *Journal of Geophysical Research-Space Physics*, 109, A02104 (2004)
21. Verigin MI, Slavin J, Szabó A, Kotova GA, Remizov AP, Rosenbauer H, Livi S, Szegő K, Tátrallyay M, Schwingenschuh K, Zhang TL: Unusually Distant Bow Shock Encounters at Mars: Analysis of March 24, 1989 event, *Space Science Reviews*, 111(1), 233-243 (2004)
22. Szőkefalvi-Nagy Z, Demeter I, Kocsonya A, Kovács I: Non-destructive XRF analysis of paintings, *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, 226, 53-59 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	190	Ebből kutató ² :	128
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			45
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			215
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			203
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	174	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	9
nemzetközi együttműködés keretében:	145	SCI által regisztrált folyóiratban:	161
összesített impakt faktor:	410	összes hivatkozás száma ⁴ :	4000
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			3500
Megjelent könyv:	2	könyvfejezet:	1
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	130	poszterek száma ⁶ :	65
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			29
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	27	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	9
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			970 MFt
Beruházási támogatás:	12 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	14
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			28
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	71 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			20
EU forrásból:	8	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	153 MFt
Egyéb:	12	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	46 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			8
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	34 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			- MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet

A Magfizikai Főosztály kutatói meghonosították a magnetooptikai Kerr effektuson (MOKE) alapuló érintésmentes magnetometriai technikát. Fejlesztési eredményük a konverziós elektron Mössbauer-polariméter is, amely a világon jelenleg egyedülálló eszköz. Felhasználása: mágneses vékonyrétegekben a mágnesezettség hatásvonalát és irányát lehet meghatározni.

Az ITER tokamak tervezéséhez az RMKI Plazmafizikai Főosztályán elkészült egy 50 oldalas tanulmány a bolometrikus tomográfiai mérőberendezés működtetéséhez.

A Számítástechnikai Hálózati Központban (SZHK) megtörtént az *NIIF/HUNGARNET Videokonferencia projekt* keretében elnyert és telepített kutatói videokonferencia hálózat részét képező berendezések folyamatos használatra alkalmas, „üzemszerű” állapotba hozatala. Ugyanitt elkészültek az RMKI-ban használt videokonferencia rendszerek (H323/VRVS) “Felhasználói útmutatói” és a WEB felületen történő konferencia- és teremfoglalási rendszer.

Az RMKI SZHK munkatársai az ATOMKI, CSKI, ELTE Fizikai Tanszékcsoporthoz, MTA MFA és az MTA SZFKI kutatóival együttműködve létrehozták a PhysHun "A magyar fizikus szakmai közösség tudásvagyonának integrálása a nemzetközi PhysNet rendszerbe" nevű internetes szakmai keresőrendszert.

MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly-Thege M. út 29-33, 1525 Budapest, Pf. 49

Telefon: 392-2234, Fax: 392-2226

e-mail: barsony@mfa.kfki.hu, honlap: www.mfa.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A 2004. év az intézet életében számos alapvető változást hozott. Az igazgatóváltás kapcsán elvégezték az intézet SWOT analízisét és meghatározták a legfontosabb prioritásokat. Kiemelt feladatként folytatták az intézet szakmai profilján belüli témakonzentrációt. Hangsúlyosan szolgálja ezt a célt az MFA szervezeti struktúrájának átalakítása, a felelőségek egyértelmű meghatározása. Az intézet átszervezett osztályai, a 12 önálló témagazdálkodású kutatócsoport ill. laboratórium *a négy fő kutatási iránynak megfelelő főosztályokba szervezve* szorosabban működik együtt a területen folytatott kutatások *szakmai- koncepcionális irányításáért felelős főosztályvezetők* irányítása alatt, az igazgató és általános helyettese felügyelete mellett. Munkájukat az adminisztratív és műszaki osztályok segítik a gazdasági igazgató irányításával. Az új szervezetben számos személycserére, vezetőváltásra is sor került, melyben érvényesítették a fiatalítás szempontjait is. Az igazgatót az új operatív, nyolctagú Tudományos Tanács és az előző akadémikus-igazgató vezetésével működő négytagú Intézeti Tanács támogatja.

A 2004-es év gazdaságilag az MFA számára nem a legjobb előjelekkel indult. A hároméves EU FP5-ös projektek, az első körös Széchenyi NKFP projektek és a kisebb OTKA ill. NKTH támogatta projektek zömmel 2004-ben zárultak. Ezért feladataik között hangsúlyosan szerepelt a pályázási kényszer mind a hazai, mind a kis nyerési eséllyel kecsegtető EU FP6 keretprogramban, ami igen nagy terhet rótt a kutatógárdára. A pályázati sikerességre annál égetőbb szükség volt, mivel a több ízben érvényesített évközi támogatás-elvonás, a kutatást sújtó ÁFA intézkedések kihatásai, a rendkívül megnövekedett bürokrácia, az EU előírások érvényesítése tovább csökkentette az intézet forrásait. Ezért számos költségkímélő szigorítás is szükségessé vált 2004-ben, beleértve egy egységes intézeti fiatalítási stratégia tapintatos bevezetését.

Mindezt úgy kellett megvalósítaniuk, hogy nem veszthették szem elől az MFA számára döntő *„nanotechnológiai fordulatot”*. 2004-ben fejeződött be a 2002-es műszerpályázaton nyert röntgendiffrakciós nagyberendezés ill. labor használatbavétele, de nagyobb műszerberuházásra ebben az évben csupán a mikrotechnológiai területen, egy felújított négycsöves CVD reaktor beszerzésével került sor. Saját erőből ennek ellenére folytatták a laboratóriumok felújítását, elsősorban a fotonikai és nanotechnológiai területeken. Megszüntették a KFKI-ban nagy hagyományokkal rendelkező, de sajnálatos módon talaját vesztett oxidkristály-előállítást ill. epitaxiás rétegnövesztést, a berendezéseket részben értékesítették. Az intézet nagy lépést tett a multidiszciplinaritás irányába azzal, hogy elkezdte egy új kutatási irány megalapozását. A bioreceptor- és bio-önszerveződés kutatása és eredményeinek adaptációja személyi és tárgyi feltételeit egyrészt egy másodállású tud. tanácsadó bekapcsolódásával, másrészt egy korszerű biolabor kialakításával teremtették meg. Ezt támogatta 2004-ben a Veszprémi Egyetem Informatikai Karán a Nanotechnológia Tanszék közös megalakítása, melynek Nanoszenzorika professzori laboratóriuma az MFA-ban működik.

Megelégedéssel állapítható meg, hogy az erőfeszítések meghozták gyümölcsüket. *A kedvezőtlen hatások ellenére az MFA-nak sikerült mind a tudományos, mind a gazdasági mutatók tekintetében az előző év eredményeit elérnie vagy túlszárnyalnia.* Ami talán a

legfontosabb; számos kutatási téma kapott új lendületet az átszervezés és fiatalítás révén. Az elnyert projektek, az új kooperációs kapcsolatok és az érezhető lendület biztató jel a jövőre nézve is, bár továbbra is gond a hazai ipari kapcsolatok elégtelensége.

Az MFA kutatásai a négy főosztály szakterületén folynak: *Mikrotechnológiai, Nanotechnológiai, Szerkezetkutatási*, valamint *Fotonikai-optikai kutatások*. Szervezetileg integrált formában ezeket egészítik ki az elméleti fizikai, a – sok esetben már önálló – informatikai, biomérnöki kutatás-fejlesztések. A kutatott főbb témacsoportok:

Mikrotechnológiai Főosztály:

- Kristályos és vékonyréteg napelemek és optikai mikroelemek;
- Vegyületfélvezető fényemittáló és detektorelemek;
- InP alapú LED-ek tilos-sáv mérnökséggel a közeli infravörös tartományban;
- Mikroérzékelők, félvezető alapú integrált érzékelők kutatása, a gázérzékelés, a "mesterséges szaglás", tapintás, nyomás- és áramlásmérés céljaira;
- Felületi akusztikus hullámszűrő-eszközök;
- Fotonkristályos anyagok;
- Nanoszemcsés memóriaszerkezetek vizsgálata;
- Vegyületfélvezetők (SiC, GaN, stb.).

Nanotechnológiai Főosztály

- Speciális szén nanocsövek (spirálok, Y-elágazások, „gyöngysorok”) előállítása;
- Hordozóra helyezett nanoszerkezeteken történő alagutazás 3D szimulációja;
- Szén nanocsövek ionsugaras módosítása;
- Szén nanocsövek mintázat szerinti növesztése különböző gáزدetektor-chipekre;
- Fém vékonyrétegekben nanoméretű ionporlasztással kialakított periodikus szerkezetek optikai tulajdonságai;
- Természetes fotonikus kristályok (lepkeszárny, havasi gyopár) vizsgálata;
- Komplex rendszerek kutatása, statisztikus fizika felhasználása a játékelméletben;
- Kerámiaanyagok és nanokompozitok speciális alkalmazásokra;
- Hidroxipatit nanoszerkezetek biokompatibilis kompozit-bevonatokhoz;
- Volfrámkutatás, meghibásodási mechanizmusok azonosítása.

Szerkezetkutatási Főosztály

- Egy- és többkomponensű vékonyrétegek, kompozitok kialakulásának atomi modellje;
- C-Ni nanokompozit és TiAlCN kemény bevonatok mechanikai és más fizikai tulajdonságainak értelmezése, a szerkezettel való kapcsolata;
- Merőleges mágnesezettségű vékonyrétegek;
- Nanoszerkezetek fázisanalízise új „imaging plate”-s kísérleti adatfelvétellel és saját fejlesztésű („ProcessDiffraction”) programmal;
- Nitrid alapú és más széles tiltott sávú félvezető vékonyréteg-rendszerek hibaszerkezete, növekedési mechanizmusa és kontaktusai;
- Kettősrétegek MD szimulációja, a keveredés mechanizmusának tanulmányozása;
- EPES módszer alkalmazása szabadúthossz meghatározására felületi korrekcióval polimerekben, ill. H kimutatása polimerekben;
- AES mélységi térképezés, felületi károsodás vizsgálata plazmon spektroszkópiával;
- Ion bombázás indukált határfelületi morfológia fejlődése;

- Au nanoszemcsék katalitikus hatásának vizsgálata elektronspektroszkópiával;
- FeSi nanoszerkezetek önszerveződő növesztése és vizsgálata;
- Orvosbiológiai implantok felületi morfológiájának optimalizálása.

Fotonikai Főosztály

- Szabadalmaztatott, széles szögű képalkotó ellipszométer in-line CVD folyamat-ellenőrzésre;
- Szabadalmaztatott, tükrös rendszerű, nagyfelületű Makyoh topográfia;
- Optikai modellek fejlesztése többkomponensű anyagcsaládok ellipszométeres vizsgálataira;
- Mágneses anyagvizsgáló eljárások;
- Rács-csatolt hullámvezető szenzorok biológiai receptorok alkalmazására;
- Képfeldolgozás-alapú informatikai kutatások orvosi és biztonsági alkalmazásokra;
- Kvantitatív elektrokardiológiai és mozgás analízis.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Az alább ismertetett kutatási témák nem fedik le az intézet tevékenységét, ezért a melljük írt tájékoztató jellegű kutatólétszámok és bevételek sem teszik ki az intézet létszámát és bevételét. Az MTA alapellátás 2004-ben is csak a bérek fedezetére volt elegendő (amit külön nem tüntettünk fel), a kutatásokat pályázati, esetenként vállalkozási bevételekből finanszírozták. A gazdasági hasznosítás közvetlenül a megjelölt ipari partnereknél történik, a társadalmi hasznosság az intézetben ill. munkatársai által oktatott egyetemi hallgatók, doktoranduszok képzésében nyilvánul meg.

Mikrotechnológiai Főosztály

A Mikrotechnológiai Osztály elsődleges feladata 3 dimenziós *mikro-erőmérő szerkezetek kifejlesztése volt tapintás-érzékelési célokra*. Az NKFP “Érzékelő számítógépek és távjelenlét” c. projekt keretében új mikromegmunkálási technikák kidolgozásával két, egymástól eltérő szerkezetű mikro-erőmérőt állítottak elő. Egy robotkar két "ujjára" szerelt, 4-4 érzékelőt tartalmazó chippel sikeresen demonstrálták az érzékelők működőképességét. A perspektivikus munka az Info-Bionikai Kutatóközpont keretében MFA-SZTAKI-PPKE kooperációban folyik tovább (5 kutató és 6 technikus, 18 MFt NKFP támogatás).

2004-ben a WESZTA-T Kft-ben elkészült egy robbanásbiztos gázérzékelő-távadó műszer prototípusa, amely az éghető gázok veszélyes koncentrációjának mérésére és megfelelő betanítási művelet után egy-egy adott gázösszetétel felismerésére alkalmas. A műszer érzékelője az osztály munkatársai által a 2004-ben sikeresen lezárult EU FP6 „SAFEGAS” program keretében kifejlesztett integrált gázérzékelő chip (2 kutató és 2 technikus, 6 MFt vállalalkozási szerződésből).

Fontos alapkutatói eredmény a *pórusos szilícium multirétegek képződésének in-situ vizsgálata* a reflexiós spektrum alapján, melynek segítségével a pórusos-Si Fabry-Perot mikroméretű üregrezonátor transzmissziós sávjának *félérték szélességét a korábbi 10 nm feletti értékről 3nm-re sikerült lecsökkenteni* (2 kutató és 2 technikus, 6 MFt vállalalkozási szerződésből).

Igen változatos *piezoelektromos finomkerámia* hordozókon készítettek *felületi akusztikus hullámszűrőket* a NATO SfP CERSAW projekt keretében, amely 2004-ben fejeződött be (2 kutató és 4 technikus, 4Mft, NATO).

Az újonnan szervezett Félvezető Karakterizáció Osztály alap kutatásainak fontos része az adalékolás elemi folyamatainak pontos megismerése és megértése. A *nagyon sekély, implantált adalékprofilok meghatározására Si-ban* (1 keV - 20 keV B⁺) különféle hőkezelések után egy erre a célra kifejlesztett nagyon vékony, ék alakú anódos oxidréteg lemarásával jutottak „ferdeciszolathoz”. A visszamaradó bór adalékkoncentrációját 660 keV energiájú ¹¹B(p,α)⁸Be magreakció segítségével térképezték fel, a „profil” pontos mélységskáláját az oxidvastagság spektroszkópiai ellipszometriás mérésével határozták meg a 2004-ben zárult EU FP5 FRIENDTECH projekt keretében (5 kutató, 60 kEuro).

SiC-ban vizsgálták az MFA-ban és a Rossendorf-ban végzett *Ge, Al, N implantációk* és az 500 keV-es *csatornairányú N implantációval keltett rácshibákat és a kialakuló adalék-eloszlást*. Az eredményeket összehasonlították a *Crystal-TRIM* program MFA-ban SiC-ra továbbfejlesztett számításaival és jó egyezést kaptak (4 kutató, 3 Mft OTKA).

Különböző Si/nc-SiC/SiO₂ rendszereket hoztak létre hőkezeléssel *SiC nanokristályok* tanulmányozására. SEM és TEM vizsgálattal megállapították, hogy a Si/SiO₂ határfelületen nukleálódó *SiC nanoszemcsék méretét, morfológiáját és nukleációsűrűségét* erősen befolyásolja a Si hordozó orientációja. A kvantumhatások tanulmányozásához kisebb szemcsék létrehozása szükséges. A nano-SiC munkához kapcsolódva megkezdték a fenti *SiC-szemcsék növekedése atomi modelljének kidolgozását* a SiO₂/Si határfelületen. Folytatódott a SiC kvantum pöttyök CV mérése (3 kutató, 2 Mft OTKA).

2004-ben indult az EU FP6 SEMINANO projekt „*Szigetelőkbe ágyazott félvezető nanokristályokat tartalmazó szilícium alapú MIS szerkezetek*” vizsgálatára (2 kutató, 20 k€).

Az újonnan szervezett Optoelektronikai Osztályon 2004-ben sikerrel zárult az EU FP5 ADVOCATE projekt, melynek célja a *kristályos Si napelemgyártás folyamatos üzemű száraz technológiának a kutatása*. A 150X150 mm² multikristályos Si szubsztráton az MFA plazma-immersziós ionimplantációs adalékolásával 13-13,5 % hatásfokot értek el, az emitter-szerkezet előállítása szitanyomtatással felvitt adalékolt ezüst paszta beötvözésével folyik (4 kutató és 6 technikus, 52k€, EU FP5).

Hagyományosan sikeres tilos-sáv mérnökségi téma az *InP alapú LED-ek kutatása*. Kiemelkedő a *kis kúpszögben sugárzó konstrukció* sikeres kifejlesztése. A kollimáltabb sugárzás miatt érzékenység javulást értek el a felhasználó ipari partnernél (Anton Parr GmbH, Ausztria) fejlesztés alatt álló vizes oldatok alkoholtartalmát mérő spektrométerében. Új eredmény a PbS fotoellenállások és ezeken alapuló detektor sorok kifejlesztése valamint GaInAsSb rétegek olvadákfázisú növesztése (4 kutató és 3 technikus, 10 Mft ipari szerződés).

A félvezető szenzorok elektronikus zaja eredetének kutatása, az alacsonyfrekvenciás zajmérő laboratórium és kultúra meghonosítása fontos integráló téma. Ez évi legfontosabb eredményük: az MFA PbS rétegek és a belőlük készített infravörös érzékelők zaja az érzékelés mechanizmusából eredő elvi minimum (3 kutató és 2 technikus, 2 Mft OTKA).

Nanotechnológiai Főosztály

A Nanoszerkezetek Osztály egyik fő feladata a *szén nanoszerkezetek* előállítása, módosítása, vizsgálata, gyakorlati alkalmazása adszorpciós gázérzékelési célokra és kompozit anyagokban. Az előállítás kétféle módszerét vizsgálták:

1. *Víz-alatti, váltóáramú elektromos ívkisülés*: az így előállított szén nanocsövek minőségére meghatározó befolyással bír az elektródák közötti szög.
2. Különböző *szénhidrogének és katalizátorok porlasztásos pirolízissel* való előállításnál azt tapasztalták, hogy jó minőségű nanocsövek a legnagyobb mennyiségben xilén és ferrocén/nikkelocén keverék alkalmazásával állíthatók elő. E módszer segítségével eljárást dolgoztak ki a szén nanocsöveknek egyenesen a detektor-chipre való növesztésére.

A szén nanocsövek módosítása nagy jelentőségű a szelektivitás és érzékenység növelésére a gázérzékelésben, illetve a mátrixhoz való kémiai kapcsolódás erősítésére kompozit anyagokban. A szén nanocsövek módosítására, a *kémiai funkcionálizálást és az ionbesugárzást* tanulmányozták. Kimutatták, hogy a kémiaileg funkcionálizált szén nanocsövek között erős kémiai kötés van, és a funkcionálizálás elősegíti a gáزدetektorokban alkalmazott szén nanocsövek szelektivitásának növekedését. A szén nanocsövekben ionbesugárzással keltett hibák közvetlen szomszédságában szuperstruktúrákat találtak. Sikeres gázérzékelési előkísérleteket végeztek a szén nanocsövek ellenállás-változásának mérésével (8 kutató, 32 MFt, NANOGAS MEH-MTA projekt).

Igazolták, hogy többfalú szén nanocsőben – kis feszültség esetén – csak a *külső falak vezetik* az elektromos áramot, a belső falak csak nagyobb feszültségnél kapcsolódnak be. Szerkezeti modell segítségével hengerspírál alakú szén nanocsöveket és nyaklánc-szerű nanoszerkezeteket sikerült leírniuk. Ezek a nanoszerkezetek sokkal előnyösebbek a kompozitokban való alkalmazás szempontjából, mint az egyenes nanocsövek. Kimutatták, hogy hengerspírál nanocsövek feltekeredésének mikéntjét nem a külső körülmények, hanem az atomi szerkezet, azon belül pedig a nem hatszöges gyűrűk elhelyezkedése határozza meg.

Az STM alagutazás sajátosságait leíró 3D szimulációs szoftverükkel vizsgálták a szén nanocső Y-elágazásokon történő alagutazást és igazolták, hogy a lokális hibák hatása több nm távolságban is észlelhető.

A fenti szén nanocső témák *gazdasági jelentőségét* az adja, hogy ezzel a módszerrel jelentősen miniaturizálható, nagy érzékenységű gázérzékelő detektorok állíthatók elő (8 kutató, 14 MFt, OTKA).

Az osztály másik jelentős kutatási területe a *biológiai eredetű nanoszerkezetek*. Optikai spektroszkópiai és SEM mérésekkel, valamint elméleti számításokkal igazolták, hogy a magas hegységeken élő havasi gyopár UV védelme a felületét borító szőröcskékre jellemző természetes nanoszerkezeteken alapul. Lepkeszárnyakon található fotonikus kristály szerkezetek tanulmányozására jelentős összegű Európai Unió támogatást nyertek (FP6 NEST/STREP), ennek felhasználása 2005-től indul (3 kutató, 2MFt OTKA).

Az MTA-FNRS (Belgium) egyezményes utakra alapozva több mint tíz éve mindkét tématerület kutatásában termékeny kapcsolat alakult ki a Namur-i (Belgium) Facultes Universitaires Notre Dame de la Paix és az MFA között, ami >40 közös referált cikket eredményezett.

A LEO1540XB *nanotechnológiai munkálmáson* fém vékonyrétegek *plazmonikai* tulajdonságainak vizsgálatához, nagy adatsűrűségű *DVD technológiai* fejlesztéshez kezdték el az ion-

sugaras megmunkálást, valamint *sejtautomata* (MQCA) létrehozásához mágneses nanopöttyöket alakítottak ki hazai és nemzetközi kooperációban (2 kut, 8 MFt, NKFP és OTKA).

A Kerámiák és Kompozitok Osztály feladata új tulajdonságú kerámiák és keramikus kompozitok előállítását a mikro- és nanoszerkezetekkel végzett módosítással.

A *szén nanocsővel erősített kerámia mátrixú kompozitok*at kutatva sikerült javítaniuk az előtermék homogenitását. Szinterelési kísérletekkel kimutatták, hogy az általuk előállított nanokompozitok esetében elkerülhető a szén nanocső magas hőmérsékletű degradációja. Elsőként állítottak elő szén nanocső-szilíciumnitrid kompozitnak tekinthető anyagot (2 kutató, 1 mérnök, 3MFt OTKA).

A szilícium nitrid alapú *keramikus anyagok* tulajdonságait a *felület módosításával* is befolyásolni lehet: szén és nitrogén ionok implantálásával, lézeres besugárzással. Az implantáció hatására a felületi repedéseket okozó kritikus hibák megszűnhetnek, amivel nemcsak a keménység, de a szilárdság is javítható (2 kutató, 4 MFt OTKA).

Új kutatási irányként *nano- és mikroszemcsés hidroxipapatit* valamint egyéb kalciumfoszfát porokat állítottak elő természetes anyagok felhasználásával, és egy egyszerű, gőzfázisból történő lecsapási eljárást dolgoztak ki. A hasznosulást ígérő cél megfelelő szilárdságú bioaktív kompozit kifejlesztése humán implantátumokhoz. Szintén új téma a nanoszemcsés, illetőleg nyitott szerkezetű volfrámoxid vegyületek funkcionális alkalmazása a szenzorikában (2 kutató, 2 MFt, MTA-OTKA-NSF projekt).

A “Deutérium lámpa fejlesztése kémiai elemzés és UV spektroszkópia céljára” c. EU5 projekt sikerrel zárult. A Cathodeon cég gyártmányaiban máris alkalmazza az MFA technológiai javaslatait. 2004-ben zárult a GE Hungary vezette “Fémhalid autólámpák fejlesztése” c. NKFP projekt is, fő eredménye a volfrám szabad felületén ülő ThO₂ részecskék elektronbesugárzás indukálta redukciója és az elektronemissziós hatások összefüggésének feltárása volt. A *megnövelt élettartamú lámpák sorozatgyártása elkezdődött a GE Hungary-nál* (4 kutató, 16 MFt NKFP).

Az alapvetően alapkutatót folytató Komplex Rendszerek Osztálya a *nemegyensúlyi fázisátalakulások feltárásával*, a társadalmi folyamatokra alkalmazott játékelméleti számításokkal és Lotka-Volterra modellek fejlesztésével foglalkozik. A statisztikus fizika módszereit a térbeli evolúciós játékokra kiterjesztve rámutattak a komplex struktúrák kialakulásának egy olyan változatára, amiben az elemi egységek (stratégiák, fajok, stb.) önálló térbeli szerkezettel és dinamikai mechanizmussal rendelkező társulásokot hoznak létre. A meglepően sokféle egyensúlyi állapot kialakulását (ill. az ezzel együtt járó állapotváltozásokat) a társulások közötti versengés határozza meg, ha a rendszer elegendően bonyolult (4 fős csoport, 2 MFt OTKA).

Az *adaptív szűrési módszerek* alkalmazásával európai népzene adatbázisok alkalmas kódolásával és összehasonlító vizsgálatával, a népzene szerkezetének analízisével kimutatták a legősibb zenei formák jelenlétét ill. bizonyos dallamok hiányát egyes európai kultúrákban, ami a zenei rokonságra, ill. a dallamok eredetére és elterjedésére enged következtetni. (1 kutató, kb. 2 MFt OTKA).

Szerkezetkutatói Főosztály

A Vékonyrétegfizikai Osztály feladataiban a *nanokompozit rétegek kutatása* részarányának igen erőteljes növelése volt megfigyelhető. Modellszerűen összegezték a vékonyrétegek kialakulásának atomi folyamatait egykomponensű rendszerek esetére, majd a modellt két- és többkomponensű rendszerekre fejlesztették tovább, különös tekintettel a nanokompozitok kialakulására. Alkalmazták a FULLMAT projektben a C-Ni nanokompozit vékonyrétegek kutatásában (3 kutató, 15 k€, EU5) és ipari partnerekkel való együttműködésben (hasznosító: EDI Modul Kft.) a lezárult NANOCOMP projektben (3 kutató, 35 k€, EU5) TiAlCN kemény bevonatok mechanikai tulajdonságainak értelmezésére. Sikeresen dolgoztak a *súrlódás-csökkentő és kopásálló nanokompozit bevonatok* fejlesztésén az új NAPILIS projektben (4 kutató, 30 k€, EU6) külföldi ipari partnerekkel együtt.

A nanoszerkezetek kialakulása területén szerzett tapasztalatokat alkalmazták az akitai (Japán) együttműködésben *merőleges mágneses adattároló rétegrendszerek* fejlesztésére (1 kutató, 1 MYen).

A *nanoszerkezetek fázisanalízisének új módszerét* fejlesztették ki, amely a gyűjtött kísérleti adatokat dolgozza fel az egymástól egymilliószorosan eltérő, nagyon nagy és nagyon kicsiny elektron intenzitások egyidejű pontos mérését lehetővé tevő „imaging plate” eszközökkel. A módszert megvalósító („ProcessDiffraction” néven ismertté vált) számítógépes programjukat a világ számos laboratóriumában (1500 letöltés) kezdték el használni (1 kut, 2,5 Mft, OTKA).

Új EU FP6-os pályázatokat nyertek (két IP), melyekben a munka 2005-ben kezdődik.

A Felületfizikai Osztály fő feladata 2004-ben is az Auger spektroszkópia alkalmazása volt felület- és mélységi profilvizsgálatra.

Kiemelkedő eredményük a szilárd testekben a felület közelében folyó közepes energiájú elektron transzport alapadatainak kimérése (4 kutató; 1 Mft OTKA és MTA–Lengyel Akadémiai együttműködés).

Az *ionbombázás indukálta változások kísérleti és elméleti vizsgálata* jól forgalmazható ionágyúk kifejlesztéséhez vezetett a hasznosító cégnél, a Technoorg-Linda Kft.-ben (6,5 kutató; 7 Mft NKFP és 4,2 Mft több OTKA).

Molekula-dinamikai szimulációs módszerrel vizsgálták az ionindukált határfelületi keveredést különböző kettős rétegekben. Felismerték, hogy *a kettős rétegben a keveredés hasonló körülmények között sokszorosa annak, amit az egyes tiszta rétegekben tapasztalhattak*. Ez alapján javasoltak egy új keveredési mechanizmust, melynek értelmében az ionkeveredést szinte kizárólag ballisztikus folyamatok irányítják.

A Vékonyréteg-Nanorendszerek Osztály munkaterülete a *méretfüggő anyagtulajdonságok, kölcsönhatások kimutatása* szilárd testekben elsősorban elektron-szerkezeti alapon, továbbá azok értelmezése és alkalmazása.

Hagyományos szobahőmérsékletű párologtatással és azt követő *in-situ* nagyvákuum hőkezeléssel β -FeSi₂ nanoszerkezeteket készítettek. A szobahőmérsékleten Si-ra párologtatott, majd hőkezelt 2 nm-es Fe rétegből a hordozóba süllyedt *nanoméretű, epitaxiális félvezető β -FeSi₂-szigetek* keletkeztek. Ez a rendszer alkalmas lehet szilícium alapú

optoelektronikai célokra (1,5 kutató, 2 MFt OTKA). A felismerések elsősorban alapkutatás jellegűek, felhasználásuk csak hosszabb távon hozhat gazdasági hasznot.

Egy EU5-ös projektjük témája a felületi morfológia minőségének javítása *orvosi fém-implantátumokban*. Ennek keretében dolgozták ki a Mn-nal adalékolt hidroxil-apatit rétegek kialakítását titán felületen lézeres párologtatással és ion-implantációval. A rétegek tulajdonságait XPS és FTIR analízissel, tapadását ún. „direct-pull” módszerrel határozták meg. Az eredményeikkel teljesülnek az EU5 pályázat célkitűzései, és rendelkezésre áll egy a *protézisek és implantátumok felületét bioaktívvá tevő hazai eljárás* (3 kutató, 50 k€ EU5). Nemzetközi szabadalommal védett eljárásukkal lényegesen jobb csontintegráció, növekedés, tartósság, gyorsabb gyógyulás érhető el a humán fogorvosi felhasználás területén.

A KK Izotóp- és Felületkémiai Intézet munkatársaival közösen kimutatták, hogy a CO oxidációjában az arany megnöveli az Fe_2O_3 *katalitikus aktivitását*. Megállapították továbbá, hogy ez a változás arany nanorészecskék esetében lényegesen nagyobb, mint a tömbi aranyánál. Ez az alapkutatási eredmény mind a katalizátor- mind a szenzor-kutatásban ígéretes.

Fotonikai Főosztály

Az újonnan szervezett Félvezető Fotonikai Osztály számos, a társosztályokkal folytatott optikai mérési kooperáció mellett a 2004-ben zárult „Hosszú élettartamú humán-izület protézisek kifejlesztése” c. NKFP projektben a *műanyag protézisek felületi keménységét növelő plazmaimmerziós kezelés in situ minősítését* oldotta meg félvezető lézeres, dózis-függő reflexióméréssel és *ex situ* felületi ellenállás méréssel. Az eredmény gazdaságosabbá teszi ezeknek a hazai gyártású (PROTETIM Kft.), életminőség javító protéziseknek az előállítását (3 kutató, 6 MFt NKFP).

A 2004-ben zárult NATO Sfp “*Bakteriorodopszin fehérje alapú optoelektronikai eszközök*” projektben hullámvezetési paraméterek mérése alapján, roncsolásmentesen határozták meg a hordozó-implantáció hatására bekövetkező törésmutató változást. Szabadalmaztatott *új módszerük az egymódusú hullámvezető szenzorokkal többcsatornás mérések elvégzését is lehetővé teszi idő-osztott multiplex megoldás alkalmazásával*. Az implantált ki- és becsatoló rácsot tartalmazó hullámvezetők, integrált optikai Mach - Zehnder interferométerek kutatása, felületi funkcionálítása a bioreceptorok befogadására hosszú távon is meghatározó feladat (3 kutató, 8k€, NATO Sfp).

Új kutatási irányuk *az elektromágneses hullámok terjedésének vizsgálata mesterséges periodikus szerkezetekben* és fotonikus kristályok előállítása (4 kutató, 3MFt, OTKA).

Az új felállásban működő Roncsolásmentes Anyagvizsgáló Osztály optikai és mágneses elven történő anyagvizsgáló módszerek kutatásával és alkalmazásaival foglalkozik, beleértve a kvantitatív mikroszkópiát.

A Fluxset szenzor alkalmazás kutatásában új, perspektívikus mérési eljárást dolgoztak ki (HM megkeresés) Al szerkezeti elemekből felépülő helikopter rotorszárny-lapátok vizsgálatára. Az erősen inhomogén mágneses térben, pl. repedések mentén az elméleti úton nyert kvantitatív mérési eredményeket kísérleti körülmények között verifikálták (2 kut, 3 MFt OTKA).

Befejezték a *gömbtükör alapú Makyoh-topográfias berendezés* építését. Az Oxfordi Egyetemmel együttműködésben az ott kifejlesztett eltolt rácsú megvilágítást alkalmazó

Makyo-h-topográfias elrendezés hazai implementációját valósították meg. Az eredmények hasznosítása EU-s pályázatokon keresztül fog megtörténni (3 kutató, 3 MFt OTKA).

Az osztály hagyományosan legerősebb területe a *spektroellipszometria kutatása*. Az Erlangeni FhG IISB Intézetben felszerelték az MFA–SzFKI fejlesztésű in situ szélesszögű ellipszometert egy itthon készült ablak-tükör-rendszer segítségével egy ottani MOCVD berendezés vákuumkamrájára és sikeres próbaméréseket végeztek (5 kutató, 4 MFt OTKA).

A *kvantitatív mikroszkópiai területen* elsősorban az orvosi patológiai mintaanalízis (Iman 3.0 szoftver a SE I.), és ipari kooperációban (Richter G. Rt., Axon) a korreláció-elemzés ill. gyártásellenőrzés feladata volt előtérben, valamint egy új Allergomat rendszer fejlesztését kezdték el (2 kutató, 17 MFt IKTA).

A Biomérnöki Osztály a 2004-ben zárult NKFP projektje keretében a Veszprémi Egyetemmel együttműködve létrehozott egy *nemzetközileg is unikális kísérleti elektrokardiológiai képkalkoló rendszert*, amely képes szívciklusonként a kamrai depolarizáció és repolarizáció tulajdonságainak képi megjelenítésére és a dinamikus változások kvantitatív követésére. A noninvazív elektrokardiológiai képkalkoló eljárásra (testfelszíni potenciáltérképezésre) alapozott új módszer nagy jelentőségű lehet a hirtelen szívhalál rizikójának előrejelzésében (3 kutató, 13 MFt, NKFP). A *mozgás idegrendszeri vezérlésének kutatása* az ezévből zárult NKFP projekt keretében mozgásukban sérült agyérbetegek kvantitatív állapotmonitorozását célozta internetes mozgásanalízissel, és a páciensek állapotát követi nyomon a kinematikai adatok rögzítésével (2 kutató, 5MFt, NKFP).

Új feladat az elosztott számítási architektúra kialakítása párhuzamos feladatok futtatására. A JGrid optimális erőforrás-allokációs rendszerük költségfüggvény alapján képes az erőforrások elosztását optimalizálni (1 kutató, 3 MFt, NKFP).

Díjak, címek, fokozatok:

A gazdasági igazgató MTA Főtitkári Dicséretben részesült. Egy kutató a Mindentudás Egyetemén tartott előadást (2004. október 11.) és megnyerte a TV2 „Az év embere” címért tartott szavazást. Egy fő Fizikai Szemle Nívódíjat kapott az ELFT 2004 éves közgyűlésén. Az MFA Kutatói Díjat, a Posztdoktori Díjat és az MFA Ifjúsági Díjat intézeti dolgozó kapta. Az MTA doktora címet 2004-ben három aktív és egy nyugdíjas kollégájuk szerezte meg (további 2 fő 2005. első napjaiban védett, egy fő lépett túl a habituszvizsgálaton). PhD. értekezését egy fiatal kutatójuk és egy külföldi doktoranduszuk védte meg.

Technológia-transzfer

Sikeres technológia bevezetést hajtottak végre a Sae Han Tungsten Co. Ltd., Namyangju-city, Dél-Korea cégnél volfrám izzószálak molibdén magjainak környezetbarát kioldására 50k\$ értékben.

Termelési/vállalkozási tevékenység

- Saját fejlesztésű kerámia-elemek kis sorozatú gyártása és értékesítése;
- Speciális felületi akusztikus hullámszűrők (SAW) tervezése és kissorozatú gyártása.

Infrastruktúra fejlesztés

Célzott támogatás híján az MFA 2004-ben is *saját erőből kényszerült jelentős felújításokat végrehajtani*, több új labor kialakítását és korszerűsítését is beleértve. *Műszerberuházást központi keretből 9,5 MFt, pályázati forrásokból 141 MFt értékben realizáltak.*

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az MFA *oktatási kapcsolatai* tovább fejlődtek, szinte az ország valamennyi jelentős egyetemével van kapcsolatuk. Az intézetben 3 kinevezett egyetemi tanár és 3 további habilitált doktor, valamint 3 főiskolai tanár dolgozik, a minősítettek 60%-a vesz részt az egyetemi, főiskolai oktatásban. 9 kutatójuk tagja egyetemek doktori tanácsának és habilitációs bizottságának.

2004-ben alakult meg a Veszprémi Egyetemmel közös Nanotechnológia Tanszék, melynek Nanoszenzorika Laboratóriuma az MTA MFA-ban működik. Az ELTE TTK-val közösen használják az MFA-ban működő Szerkezetkutatási Laboratóriumot. A BME mérnök-fizikus, villamosmérnök és vegyészmérnök képzése, az ELTE fizikus és a VE informatikus képzése rendszeresen használja az intézet nagy értékű laboratóriumait mind a graduális, mind a posztgraduális oktatásban.

Kapcsolatban állnak a BME több karával, az ELTE TTK több tanszékével, a DE Szilárdtestfizikai Tanszékkel és a Műszaki Főiskolai Karral, a SE Szájsebészeti Klinikájával, a SZTE Optikai és Kvantumelektronikai Tanszékével, a Veszprémi Egyetemmel, a Miskolci Egyetemmel, a Semmelweis Egyetem Orvostud. Karával, a Kandó Kálmán Műszaki Főiskolával.

Részvétel a hazai tudományos közéletben

Az MFA adta az MTA Műszaki Tudományok Osztályának elnökhelyettesét, a MAB egy tagját, a Széchenyi Díj egyik albizottságának egy tagját, az OM NKTH "Anyagok és nanotechnológia" EU-tanácsadóját, két fő MTA doktorképviselőt, egy fő AKT tagot, egy fő Kuratóriumi tagot; egy fő Jelölbizottsági tagot, az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság elnökét és nyolc tagját, a Szilárdtestfizikai Bizottság öt tagját, az MTA Anyagtudományi Komplex Biz. három tagját, az OTKA Elektrotechnikai és Elektronikai Zsűri egy, az ELFT tiszteletbeli elnökét, ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport titkárát, egy fő ELFT vezetőségi tagot, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport vezetőség egy tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat 3 vezetőségi tagját, az OM IST zsűri egy tagját, az Egészségügyi Telematikai Munkacsoport egy tagját, az MTA Orvosi Informatikai Munkabizottság egy tagját, a VEAB Egészségügyi Informatikai Munkabizottság elnökét.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet egy munkatársa tagja az EU Priority 3 (Nano and Materials) Programbizottságának és többen rendszeres bírálók az Európai Bizottságnál.

Az intézményekkel való szervezett kapcsolatok felsorolásától el kell tekinteni, mivel csupán konzorcialis partnereik között közel száz intézmény szerepel. A rangos egyetemek

(Cambridge, Osaka, Párizs, Linköping, Erlangen, Namur, Greifswald, stb.) mellett olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint az OSRAM, Samsung, THALES, Daimler-Chrysler, GE Hungary, Richter Gedeon, Bonn-Hungary, Cable-World, stb.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok: Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca, MICRON, valamint a "The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy" szerkesztőbizottsági tagja, EPS Council tag, 2 E-MRS Council tag, IUPAP C13 Biz. tag, Bohmische Phys. Soc. (USA) Councillor, International Society of Electrophysiology, vezetőségi tag, IUVSTA hazai képviselő, IUVSTA vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, IUVSTA MNB titkár, EUROSENSORS International Steering Committee tag.

MTA kétoldalú egyezményes és Tét kapcsolatok értékelése: Az egymást kiegészítő jellegű bilaterális kapcsolataik alapozzák meg a későbbi, nagyobb léptékű pályázataikat és a közös publikációk révén növelik ismertségüket.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

(Címszerűen csak az áthúzódóan futó, nagyobb pályázati kutatások szerepelnek)

Hazai pályázatok

NKFP

- Funkcionalizált felületek fejlesztése és alk. specifikus biokémiai és kémiai rendszerekben,
- Nanotechnológiai anyagmódosítások és metrológiájuk, 3A/071/04
- Természetes vizek, földtani közegek helyszíni analízise mikro- és nano-érzékelési módszerekkel,
- Nagyfelbontású bioelektromos képalkotó eljárás (BEM) kidolgozása az agyi forrásaktivitás megjelenítésére: Az agyi plaszticitás vizsgálata,

GVOP AKF

- Intelligens fiziológiai állapotmonitorozó és távfelügyeleti rendszer,
- Kiskoncentrációjú szénhidrogén szennyezés eltávolítása,
- Fém tárgyakba lézerrel írt logisztikai kódok elektromágneses elvű kiolvasási rendszere,
- Elektromágneses Környezetállóság és Környezetszennyezés Zártterű vizsgálatának megvalósítása,
- Új generációs vékonyítók és ionágyúk fejlesztése,
- Multispektrális képalkotó reflektométer,

Nemzetközi pályázatok

EU FP6

- NENAMAT, Network for Nanostructured Materials, SSA
- SEMINANO, SEMICONDUCTOR NANOCRYSTALS, NMP4
- NAPILIS, Nanocomposites for Piston/Liner Systems, NMP3
- INNOVATIAL, Innovative processes and materials to synthesise knowledge-based ultra-performance nanostructured PVD thin films on gamma titanium aluminides, IP, NMP3

- FOREMOST, Fullerene-based Opportunities for Robust Engineering: Making Optimised Surfaces for Tribology, IP, NMP3
- CADRES, Co-Ordination Action On Defects Relevant To Engineering Advanced Silicon-Based Devices, IST
- BIOPHOT, Complexity and Evolution of Photonic Nanostructures In Bio-Organisms: Templates for Material Sciences, STREP, NEST.

NATO Science for Peace:

- Opto-electronic devices based on the protein bacteriorhodopsin (kordinátor: SzBK)
- Surface Acoustic Wave Devices on Ceramics (CERSAW)

Az intézet kutatói és gazdasági apparátusa a 2004. év során *138 szerződést* kezelt. Az *OTKA szerződések és támogatási összegek aránya csökkent*. Négy EU 5. keretprogrambeli, két NATO SFP és öt NKFP projektjük zárult sikerrel 2004-ben. Az EU6 programokban rendkívül megnehezült jelentős támogatások elnyerése. Legfőbb gond a *nagyipar számára is attraktív témák hiánya* és az *alacsony szintű magyar kutatói bérekkel arányos EU támogatás*.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

Szabadalom:

"*Eljárás többcsatornás érzékelő mérések elvégzésére integrált-optikai hullámvezető szerkezeteken*" Szolgálati találmány, Bejelentő: MTA Anyagtudományi Kutatóintézet (100%) Feltalálók: Hámori András, Bp (75 %) Nagy Norbert, Miskolc (25 %) Bejelentés napja: 2004. XI. 5.

Jelentősebb publikációk:

1. Battistig G, Garcia Lopez J, Morilla Y, Khanh NQ, Lohner T, Petrik P, Ramos AR: Effect of ion current density on damage in Al ion implanted SiC, Nuclear Instruments and Methods, B219-220, 652 (2004)
2. Vázsonyi E, Vértesy Z, Tóth A, Szlufcik J: Anisotropic etching of silicon in a two component alkaline solution, Journal of Micromechanics and Microengineering, 13, 165-169 (2004)
3. Horvath ZJ, Dozsa L, Krafcsik O, Mohacsy T, Vida G: Electrical behaviour of Al/SiO₂/Si structures with SiC nanocrystals, Appl. Surf. Sci. 234, 67-71 (2004)
4. Volk J, Balázs, J, Tóth AL, Bársony I: Porous silicon multilayers for sensing by tuneable IR-transmission filtering, Sensors & Actuators: B, 100, 163 (2004)
5. Fürjes P, Dücsü C, Ádám M, Zettner J, Bársony I: Thermal characterisation of micro-hotplates used in sensor structures, Superlattices and Microstructures, 35, 455-464 (2004)
6. Gas P, Bergman C, Lábár JL, Barna PB, d'Heurle FM: Formation of embedded Co nanoparticles by reaction in Al/Co multilayers and impact on phase sequence, Appl. Phys. Lett. 84, 2421 (2004)

7. Kovács A, Sato K, Sáfrán G, Barna PB, Hirotsu Y: The investigation of multiply twinned L10-type Fe-Pt nanoparticles by transmission electron microscopy, *Philosophical Magazine*, 84(20), 2075-2081 (2004)
8. Veisz B, Pécz B: Polarity dependent Al-Ti contacts to 6H-SiC, *Applied Surface Science*, 233, 360 (2004)
9. Kovács GJ, Sáfrán G, Geszti O, Bertóti I, Radnóczy G: Structure and mechanical properties of carbon-nickel and CN_x-Ni nanocomposite films, *Surface and Coatings Technology*, 180-181, 331-334 (2004)
10. Süle P, Menyhárd M, Nordlund K: Cooperative mixing induced surface roughening in bilayer metals: a possible novel surface damage mechanism, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Res. B222*, 525 (2004)
11. Orosz TG, Gergely G, Menyhárd M, Toth J, Varga D, Lesiak B, Jablonski A: Hydrogen and surface excitation in electron spectra of polyethylene. *Surf. Sci.* 566-568, 544-548 (2004)
12. Guczi L, Pető G, Beck A, Pászti, Z: Electronic structure and catalytic properties of transition metal nanoparticles: the effect of size reduction. *Topics in Catalysis*. 29, 129 (2004)
13. Pávó J, Gasparics A, Sebestyén I, Vértesy G: Calibration of Fluxset sensors for the measurement of spatially inhomogeneous magnetic fields, *Sensors and Actuators A-Physical*, 110, 105-111 (2004)
14. Petrik P, Cayrel F, Fried M, Polgár O, Lohner T, Vincent L, Alquier D, Gyulai J: Depth distribution of disorder and cavities in helium implanted silicon characterized by spectroscopic ellipsometry, *Thin Solid Film*, 455-456C, 344-348 (2004)
15. Eppeldauer G, Racz M: Design and characterization of a photometer/colorimeter standard, *Applied Optics*, 43, 2621-2631 (2004)
16. Riesz F: Makyoh topography: a simple yet powerful optical method for flatness and defect characterisation of mirror-like surfaces, In: *Proc. Spie 5458, Photonics Europe*, Spie, 2004, pp 86-100
17. Biró LP, Márk GI, Horváth ZE, Kertész K, Gyulai J, Nagy JB: Carbon nanoarchitectures containing non-hexagonal rings: "Necklaces of Pearls", *Carbon*, 42, 2561-2566 (2004)
18. Márk GI, Biró LP, Lambin P: Calculation of axial charge spreading in carbon nanotubes and nanotube Y junctions during STM measurements, *Phys. Rev. B*, 70, 115423-1-115423-11 (2004)
19. Balazsi C, Cinar FS, Weber F, Arato P: Manufacture and examination of C/Si₃N₄ Nanocomposites, *J. Eur. Ceram. Soc.* 24(12), 3287-3294 (2004)
20. Ódor G: Universality classes in nonequilibrium lattice systems, *Rev. Mod. Phys.* 76, 663 (2004)
21. Szolnoki A, Szabó G: Vertex dynamics during domain growth in three-state models, *Phys. Rev. E*, 70, 027101 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	141	Ebből kutató ² :	88
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			16
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			182
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			175
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	115	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	1
nemzetközi együttműködés keretében:	95	SCI által regisztrált folyóiratban:	107
összesített impakt faktor:	207,248	összes hivatkozás száma ⁴ :	1784
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1768
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	6 jegyzet: 2
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	4 jegyzet: 2
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	3
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	1
Értékesített szabadalmak száma:			1
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	124	poszterek száma ⁶ :	73
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			44
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			608 MFt
Beruházási támogatás:	10 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	13
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			22
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	42 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			25
NKFP:	14	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	146 MFt
Egyéb:	11	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	49 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			14
EU forrásból:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	73 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			- MFt

VI/a. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹³

Az intézet neve: Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

A 2004. év folyamán a következő új, ill. továbbfejlesztett eszközök készültek – mint bemutatható eredmények

Szabadalommal védett és unikális eszközök

- Új típusú, elsődlegesen TEM mintakészítésre szánt ionágyú, gyártásba viszi a Technoorg-Linda Kft.
- Szélesszögű ellipszométer adaptációja
- Robbanásbiztos gázérzékelő chippel felépített elektronikus szaglórendszer, gyártásba viszi a Weszta-T Kft.
- Multiplex kiolvasást lehetővé tevő optikai rács-csatolt hullámvezető érzékelők
- Irányított sugárzású, közeli infravörös világító dióda (LED) alkalmazása alkohol érzékelésben
- Funkcionalizált szén nanocsövek a gázérzékelésben és kerámia-kompozitokban.

RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET

1053 Budapest, Reáltanoda u. 13-15, 1364 Budapest, Pf. 127.

Telefon: 483-8300, Fax: 483-8333

e-mail: math@renyi.hu, honlap: URL: <http://www.renyi.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az alapítása óta eltelt több mint fél évszázadban az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet a nemzetközi matematikai élet jelentős központjává vált. 2004-ben is a fő feladat ennek a pozíciónak a megőrzése, megerősítése volt.

Az intézet tevékenysége már tíz tudományos osztály keretei között folyik, ugyanis a közelmúltban létrehozták az Algebrai Geometria és Differenciáltopológia osztályt, amivel egy újabb fontos terület került az intézet kutatási palettájára. Valamennyi osztály a legszorosabb személyes és információs kapcsolatban áll az általuk művelt kutatási területek más vezető központjaival. Ennek köszönhetően kutatási programjukat folyamatosan képesek a matematika fejlődése által felvetett legújabb kérdésekhez igazítani.

A kutatás tervezése az intézetben főként a személyi feltételek tervezését jelenti. Ha ez jól sikerül, az eredmények biztosítottak. Így volt ez 2004-ben is. Az intézet munkatársai közül 2004-ben egy kutató szerzett PhD fokozatot, három kutatót pedig akadémikusnak választottak. Jelenleg 11 akadémikus, 23 akadémiai doktor, 33 kandidátus, illetve PhD címmel rendelkező kutató alkotja a törzsállományt. Nagy hangsúlyt fektetnek a fiatal – PhD tanulmányaikat folytató vagy azt éppen befejező – tehetségek bevonására az intézeti kutatómunkába. 2004 folyamán további 2 új fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémiától kapott külön keret terhére. Az intézet kutatói a Közép-Európai Egyetemen közösen folytatott PhD képzés keretében 3 tanulmányait kezdő és 4 disszertációját író doktorandusz munkáját irányították. Így az utóbbi években kinevezéssel felvett fiatalok mellett, a korábbi években odaítélt, de még le nem járt fiatal kutatói ösztöndíjakat is beszámítva, 2004-ben is mintegy 20 fő ígéretes tudományos kutatói utánpótlás nevelésére volt az intézetnek lehetősége.

Az intézet munkatársai - a megelőző évekhez hasonló számban - 2004 során 149 dolgozatot publikáltak, amelyből 2 ismeretterjesztő, 147 tudományos publikáció. A tudományos publikációk közül 1 szerkesztett mű, 1 PhD értekezés, 6 könyv, 12 tudományos könyvekben megjelent könyvfejezet, 18 referált konferencia-kiadványban (könyv, folyóirat különszám stb.), 102 pedig folyóiratban jelent meg. A cikkek kettő kivételével világnyelveken jelentek meg, a hazai kiadású tudományos folyóiratok is nemzetközileg elismert angol nyelvű kiadványok.

Az intézet kutatói aktívan részt vettek az egyetemi oktatásban, egyebek között 20 PhD hallgató, 13 szakdolgozó és 9 tudományos ösztöndíjas témavezetését látták el.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Algebra Osztály

Kidolgozták a szimmetrikus, ill. antiszimmetrikus mátrixok kvantum tereinek egységes tárgyalását a tükrözési egyenlet algebrára és pályaleképezésekre alapozva. Sikerült definiálni a klasszikus invariánselmélet és a nem-kommutatív gyűrűelmélet határán nagy szerepet játszó nyomgyűrűk megfelelőit kvantumcsoportok körében, és elemezték az így kapott algebrák

gyűrűelméleti és kombinatorikus tulajdonságait. Megmutatták, hogy a pozitív racionális számok minden részcsoportjához létezik olyan gyűrű, amely feletti $n \times n$ -es és $m \times m$ -es mátrixgyűrűk pontosan akkor izomorfak, ha n/m eleme a csoportnak. Ideálméleti leírásokat adtak primitív involúciógyűrűk különböző osztályaira. Véges test feletti általánosított blokkmátrixok konjugált osztályainak az elemszámával kapcsolatosan sikerült olyan példákat konstruálniuk, amelyek több kérdésre a várttal ellenkező eredményt adnak. A végtelen csoportok konjugált osztályai, ill. nem felcserélhető részalalmazai maximális mérete közti összefüggésre a korábban ismertnél lényegesen erősebb eredményt bizonyítottak. Általános homológikus formulát nyertek sima, kompakt sokaságok közti általános immerzió többszörös pontjai alkotta sokaság Pontrjagin-számaira és szignatúrájára.

Algebrai Geometria és Differenciál Topológia Osztály

Folytatták a Friedlander-Milnor sejtéssel kapcsolatos munkát, ami kötődik a komplex varietások magasabb K -csoportjainak számolásaihoz, és egyszerűsítették Jardine egy 1993-as cikkét.

A Heegaard-Floer homológiát alkalmazva sikerült bizonyos 3-sokaságok kontakt struktúráit osztályozni, feszességüket megmutatni.

Sikerült meghatározni mindazon 3-sokaságok Heegaard-Floer homológiáját amelyek negatív együtthatós algebrai csomók menti műtét által előállíthatók. Továbbá, a felületszingularitásokra megfogalmazott Seiberg-Witten invariánsról szóló sejtésüket továbbfejlesztve, sikerült megfogalmazni, és sok esetben bizonyítani adott szingularitással bíró racionális síkgörbék karakterizálását.

Igazolták, hogy a szofikus csoportok zártak a szabad szorzatra és az emanábilis csoportokkal való bővítésre, és beágyazhatók egyszerű szofikus csoportokba. Továbbá, bizonyították Connes beágyazási sejtését és a „Determináns sejtést” szofikus csoportokra.

Algebrai Logika Osztály

Algebrai Logikában folytatták a téridő elmélet (relativitás elmélet, fekete lyukak stb.) következetes logikai megalapozását az elsőrendű logika keretein belül Megalkották a speciális relativitás elmélet elsőrendű logikai axiomatizálását. Az általános relativitás elmélet irányába való első továbblépés annak vizsgálata, hogy a kapott axiómarendszer alkalmas-e a gyorsuló (tehát nem inerciális) megfigyelők világképének leírására is. Azt kapták, hogy ehhez egy elegáns új indukciós axiómasémát szükséges és elégséges az axiómarendszerhez hozzávenni. Az így kibővített elmélet az elsőrendű logika keretein belül marad, és lehetővé teszi az olyan fontos téridő elméleti elvek bizonyítását (és pontos megfogalmazását) mint pl. az Iker Paradoxon. Ez egyben egy úgynevezett reverz-matematikai eredmény, mert azt mutatja meg, hogy a matematikai analízis eszköztárából mit szükséges beemelni a rendszerbe ahhoz, hogy a gyorsuló vonatkoztatási rendszereket (más szóval gyorsuló megfigyelőket) is kielégítően lehessen tárgyalni.

Analízis Osztály

A súlyozott Lagrange interpolációra alkalmazott szummációs eljárások konvergenciájára vonatkozó eredményeket bizonyítottak Jacobi- és Freud-súlyok esetén. Egy régebbi átlagkonvergenciára vonatkozó eredmény sorozatot sikerült általánosítani Fourier-sorokra és interpolációs polinomokra vonatkozólag. A Bernstein polinomokkal való közelítésre további eredményeket értek el úgy a véges, mint a végtelen intervallumon. Markov típusú egyenlőt-

lenségeket bizonyítottak különböző síktartományok esetére. Sikeresült lineáris funkcionálok polarizációs konstansát meghatározni különböző terekben.

Diszkrét Matematika Osztály

Nagy szögpontszámú gráfokra meghatározták az adott fát nem tartalmazó gráfok maximális élszámát, ezzel lényegében megoldva Erdős és Sós évtizedek óta nyitott problémáját.

Bebizonyították Dirac Hamilton-körökről szóló tételének reguláris hipergráfokra vonatkozó általánosítását, szintén abban az esetben, ha a hipergráf pontthalmaza elég nagy méretű.

Számos esetben sikeresült extrémális hipergráfelméleti tételt bizonyítani konkrét tiltott hipergráfok esetére, amikor a korábbi tapasztalatok alapján pontos eredményekben alig lehetett reménykedni.

Vizsgálták egy számhalmaz hármasainak összegeként előálló számok halmazát, és bebizonyították, hogyha a számhalmaz $1-n$ -ig legalább konstansszor $n/2$ számot tartalmaz, akkor ezen összegek halmaza tartalmaz n hosszúságú számtani sorozatot. Ezzel megoldották többek között Erdős és Folkman régi problémáját.

Ugyancsak vizsgálták egész számok halmazainak olyan részhalmazait, amelyekből képezett kéttagú összeg soha nincs az eredeti számhalmazban, alsó becsléseket adtak az ilyen típusú részhalmazok lehetséges méretére.

Számos korábbi eredményt meglepő módon egységesen magyarázva sikeresült egyszerűen karakterizálni a pozitívan végesen generált provéges csoportokat. A megoldásból számos más, korábbi kérdésre is sikeresült választ kapni.

Tovább vizsgálták végesen generált csoportok részcsoporthalmozási függvényét, és egy alternáló csoportokra épülő konstrukció segítségével belátták, hogy egy nagy tartományban lényegében minden értelmes függvény előáll ilyen részcsoporthalmozási függvényként.

Pontos feltételt adtak arra, hogy konvex politópok uniója mikor konvex.

Meghatározták, hogy mekkora konvex rács- n -szög írható bele egy nagy, de korlátos síkbeli konvex halmazba. Ennek a tételnek számos további érdekes geometriai következménye van, például meg lehet határozni a legnagyobb affin kerületű halmazt, ami az eredeti halmazba írható.

Fontos és régóta várt határeloszlási tételt sikeresült bizonyítani véletlen konvex politópokra.

Megadták digitális dokumentumok egyedi azonosítására használható úgynevezett „ujjlenyomat kód” konstrukcióját, aminek a hossza az eddig ismert legrövidebb kód hosszának csak a négyzetgyöke, sőt azt is bebizonyították, hogy a talált új kód hossza optimális, további javítás már nem lehetséges.

Extrémális jellegű tételeket bizonyítottak $0-1$ mátrixokról, amelyek nem tartalmaznak bizonyos konkrét $0-1$ részmátrixokat. Meghatározták az extrémális függvény nagyságrendjét, ha csak egyetlen kizárt részmátrix van és meglepő eredmények adódnak a kizárt részmátrix párok esetében. Fák és körök adjacencia mátrixaira vonatkozóan is vizsgálták a fenti extrémális függvényt és ezekre vonatkozóan is sikeresült belátni a korábbi sejtéseket.

Projektív síkokon nagy méretű lefoglaló halmazokra vonatkozó sűrűségi tételeket bizonyítottak, illetve új konstrukciókat találtak ilyen pontthalmazokra.

Karakterizálták projektív terek olyan nem túl nagy méretű ponthalmazai, melyek minden k dimenziós altérrel való metszetének elemszáma egy kongruenciaosztályba esik

Geometria Osztály

Tovább folytatták a geometriai és topológiai gráfok vizsgálatát. Bizonyos esetekben tovább javították az eddigi élszámbebecsléseket olyan gráfokra, melyek lerajzolhatók úgy, hogy nincs négy páronként metsző éle, illetve bebizonyították a létező legáltalánosabb tételt, ami gyengébb az eredeti sejtésnél.

Megcáfolták Erdős sejtését körökbe rajzolható alternáló, nem metsző utak maximális hosszára.

Bebizonyították, hogy legfeljebb 24 egybevágó, mindkét végén végtelen hosszú körhenger helyezhető el a térben úgy, hogy bármely kettőnek legyen közös érintkezési pontja. A kérdés Littlewoodtól származik, az új eredmény pedig az első használható felső becslés.

Meghatározták egy kör 8, 9 és 10 kongruens körrel történő legritkább fedését.

Negyven éve nyitott sejtés, hogy az egységgömb köré írt háromszöglapú platóni testek jellemezhetők a következő módon: Ha egy konvex poliéder tartalmazza az egységgömböt, és a csúcsai legalább olyan messze vannak a középponttól, mint a platóni test csúcsai, akkor a poliéder térfogata legalább akkora, mint a platóni testé. Ezt a sejtést sikerült az oktaéder és a dodekaéder esetében igazolni.

Halmazelmélet és Topológia Osztály

Homogén kompakt terekről sikerült olyan új típusú tételeket belátni, amelyekben a tér számosságának korlátozását szétválasztási tulajdonságok (pl. öröklődő normalitás) feltételezésével érik el.

Az általánosított kontinuumhipotézis feltételezése mellett teljes jellemzését tudták megadni a kompakt szétszórt terek (vagy ekvivalensen: a szuperatomos Boole-algebrák) ω_2 -nél rövidebb számosság-sorozatainak. Ismeretes, hogy ez ZFC-ben már az ω_1+1 hosszúságú ilyen sorozatokra sem lehetséges.

Bebizonyították, hogy minden megszámlálhatóan szűk kompakt térnek van olyan diszkrét altere, amelynek lezártja az egész térrel azonos számosságú, ama feltevés mellett, hogy minden κ számosságra 2κ véges rákövetkezője κ -nak.

Számos új eredményt értek el fraktál-típusú halmazok halmazelméleti vizsgálatával. Így pl. belátták, hogy a Liouville-számok halmaza nem σ -végesen mérhető, s egy fontos megoldatlan problémára válaszul megmutatták, hogy konzisztens olyan nullmértékű kompakt halmaz létezése az egyenesen, aminek kontinuumnál kevesebb eltoltja lefedi az egyenest.

Információelmélet Osztály

A Shannon-elmélet területén titkossági kapacitásokat határoztak meg többfelhasználós csatorna-típusú modellekre. Ezek egyenlőnek bizonyultak a forrás-típusú modellekre vonatkozó korábbi eredményeik alapján várhatóval.

Az információelmélet statisztikai alkalmazásai területén folytatták a modellválasztási problémákra vonatkozó kutatást. A kontextus modellt általánosították nem véges emlékezetű

folyamatokra. A kontextus-fa kétféle statisztikai becsléséről bebizonyították, hogy eleget tesz mind az erős konzisztencia elméleti, mind a lineáris komplexitású kiszámíthatóság gyakorlati követelményének.

Folytatták a mértékkoncentráció problémakörében végzett kutatást, előadásorozatot tartottak logaritmikus Szoboljev egyenlőtlenségekről.

Folytatták az információelméleti motiváltságú gráfelméleti vizsgálatokat is, elsősorban gráfszínezésekre vonatkozólag. Itt a kromatikus szám mellett fontos paraméterek a lokális kromatikus szám és a cirkuláris kromatikus szám, ezekre topologikus módszerrel alsó korlátokat határoztak meg, melyek több fontos esetben pontosak.

Bebizonyították a korábbi sejtést, hogy Kneser gráfok esetén a cirkuláris kromatikus szám megegyezik a kromatikus számmal.

Számelmélet Osztály

Vizsgálták a prímeikkel kapcsolatos additív problémákat, különös tekintettel a Goldbach-sejtés gyengített változataira. Megjavították a két prímszám összegeként elő nem álló számok számára adható becsléseket. Tovább javították a két prímszám és néhány 2-hatvány összegeként való előállításokra vonatkozó eredményeket a használt 2-hatványok számának vonatkozásában.

Újabb eredményeket értek el az egész számok parkettázásainak periódusára adható becslések területén.

Vizsgáltak az összeghalmazok szerkezetével kapcsolatos különféle kérdéseket, mint a különböző lehetséges összeghalmazok számossága, valamint olyan halmazok konstrukciója, amelyeknek a megszorított összeghalmaza kicsi. Egy régóta folyó, most befejezett és benyújtott munka kiterjeszti a kis összeghalmazú véges halmazok leírását olyan esetre, amikor csak egy tetszőleges gráf mentén képzett összegek számára van korlát.

Valószínűségszámítás és Statisztika Osztály

Erős invarianciát bizonyítottak a bolyongás és Wiener folyamat kirándulásainak nagyság szerint rendezett hosszaira és magasságaira.

Megvizsgálták GARCH folyamatok paraméterbecslését azon esetben, ha a generáló változók végtelen szórásúak; ilyen folyamatokra a quasi-maximum likelihood becslésnél hatékonyabb módszert konstruáltak. Több, GARCH folyamatok paraméterei megváltozásával kapcsolatos határeloszlástételt bizonyítottak.

Bebizonyították a klasszikus Kolmogorov-Erdős-Feller-Petrovski teszt részsorozatokra vonatkozó analogonját. Ez elegendően ritka részsorozatok esetén a klasszikustól lényegesen eltérő nagyságrendet szolgáltat.

Puha biliárdok keverési tulajdonságait vizsgálták két dimenzióban. Exponenciális korrelációlecsengést bizonyítottak 2-dimenziós puha biliárdok egy osztályára. Ehhez egyfajta simasági feltétellel kellett kiegészíteni az ergodicitást biztosító feltételeket. Ezen kívül bebizonyították magasabb dimenziós puha biliárdok egy osztályának hiperbolicitását.

Módszert fejlesztettek ki Boole hálózatok felépítésére microarray mérési eredmények alapján, és új clusterező eljárásokat dolgoztak ki e mérések statisztikai analízisére.

Alkalmazások

A Rényi Intézetben elsősorban továbbra is elméleti alapkutatások folynak, azonban az utóbbi években a matematika egyre több alkalmazása felé mutató kutatás is elkezdődött. A korábban megkezdett kriptográfiai kutatásokat 2004-ben is folytatták, habár a korábban lezárult, ilyen irányú NKFP projekt folytatását, elsősorban az ipari partnereknél tapasztalt bizonytalanságok miatt nem sikerült beindítani. Sikeresen kombinálták a kriptográfiai és az adatbázisok elméletében folytatott kutatásaikat és eredményeket értek el az alábbi kérdésben: hogyan lehet egy nem nyilvános adatbázis elemeire vonatkozó bizonyos típusú kérdéseket úgy megválaszolni, hogy az adatbázisban szereplő egyéni adatokat ezekből a válaszokból semmiképpen se lehessen megismerni.

Az Intézet korábbi, egyrészt a filogenetikus fák elméletében, másrészt a statisztika bioinformatikai alkalmazási irányában folyó kutatásokra alapozva 2004 második félévében egy országos bioinformatikai szemináriumot indítottak el, mely a vártnál is nagyobb érdeklődést hozott, elsősorban az orvosok és biológusok körében. A szemináriumon folyó munka eredményeként egy együttműködési kezdeményezés van kialakulóban elsősorban a Rényi Intézet, a Semmelweis Egyetem Immunológiai Intézetének és az MTA Enzimológiai Intézetének kutatócsoportjai között. Már most jól látható, hogy orvosi, biológiai körökben nagy az igény az ilyen együttműködésre, az intézetben kialakuló bioinformatikai iskola hamarosan az ilyen irányú hazai kutatások motorjává válhat.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Kapcsolatok felsőoktatási intézményekkel

Az intézet kutatói számos budapesti és néhány vidéki felsőoktatási intézmény (pl. ELTE, BME, BKÁE, DE) munkájában vettek részt állandó oktatóként, különösen nagy részt vállaltak a felsőbb éves matematikus, illetve fizikus hallgatók és doktoranduszok részére tartott előadások tartásában. Az intézet és a Közép-Európai Egyetem (CEU) közös, angol nyelvű matematikus PhD programja (PhD in Mathematics and its Applications) harmadik évébe lépett. Jelenleg 5 PhD tanulmányait kezdő és 8 disszertáció írásán dolgozó hallgatója van a tanszéknek. A program tanárait, azaz a CEU Matematika Tanszékének tagjait az együttműködés keretében továbbra is nagyobb részt az intézet adja, tagjai a két félév folyamán 11 kurzust adtak. A CEU és az egyéb egyetemek hallgatóit számba véve 2004-ben 20 PhD hallgató, 13 szakdolgozó és 9 tudományos ösztöndíjas dolgozott intézeti témavezető irányításával. Az intézet dolgozói közül kerül ki a Budapest Semesters in Mathematics angol nyelvű matematikus részképzési program (főleg amerikai diákok részére) tanárainak többsége is. 2004-ben az intézet 32 munkatársa, a kutatók 42 %-a oktatott valamelyik hazai felsőoktatási intézményben. Az intézet kutatói által 2004-ben tartott egyetemi órák száma meghaladja a 2500-t.

Az intézet a korábbi hagyományokat folytatva 2004-ben is fogadott egyetemi kollégákat – az év folyamán összesen kettőt – vendégkutatóként. Kiválasztásukban jelentős szerepet játszott, hogy témájuk kapcsolódjon az intézet kutatási profiljához.

Hazai kapcsolatok

Folytatódtak az intézeti kutatócsoportok heti rendszerességű szakmai szemináriumai, melyek többsége túlmutat az intézet keretein, az egész hazai matematikai kutatás fő irányaira igen jelentős hatással vannak.

Az intézet kutatói a matematikai közéleti feladatok vállalásából hagyományosan jóval számarányukon felül veszik ki részüket. A jelentősebb tisztségek közé tartoznak az MTA Matematikai Tudományok Osztályában, ennek bizottságaiban, az AKT-ben és a Matematikai és Természettudományi Kuratóriumban, az OTKA bizottságaiban, a Magyar Akkreditációs Bizottságban, a Magyar Ösztöndíj Bizottságban betöltött funkciók, a Bolyai János Matematikai Társulat választmányában és ezen keresztül a MTESZ-ben való részvétel. A Bolyai János Matematikai Társulat elnöke és főtíkája is az intézet kutatója.

Két jeles esemény is mutatja az intézet jó kapcsolatát az egyetemi oktatókkal, illetve általában a hazai matematikával. Az intézetben ünnepelték a „400 év matematika” című ülészakon a híres BIG5 (Aczél János, Császár Ákos, Fuchs László, Gál István és Horvát János) 80. születésnapját, mint ahogy szintén az intézet adott helyet a Fried Ervin 75. születésnapja alkalmából rendezett országos algebra szemináriumnak is.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet kutatói hagyományosan nagyon széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Az együttműködés elsősorban kétirányú látogatásokban, közös projektekben, konferenciák közös szervezésében nyilvánult meg, az intézet munkatársai 2004-ben 13 nemzetközi konferencia vagy workshop szervezésében vettek részt. Ezek az együttműködések általában nem igényeltek intézményes formát, és eredményességüket mutatja például a nagy számú közös cikk.

Az intézet kutatói 2004-ben 9 nemzetközi tudományos bizottsági tagságot, 82 nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagságot mondhatnak magukénak, 171 előadást tartottak nemzetközi konferenciákon, sokat közülük meghívott, illetve plenáris előadóként.

2004-ben zárult le az intézet Centre of Excellence projektje, melynek során a három év alatt 39 vendégkutató összesen 75 hónapot töltött az intézetben. Ugyanakkor az Európán kívüli országokból, de részben Európából is érkeztek vendégeik más forrásokból (Fullbright, TÉT, OTKA, akadémiai csere, és egyre nagyobb mértékben az intézettől független, a látogató által szervezett forrásból) finanszírozott látogatások keretében is. A 2004 végén induló FIST (diszkrét matematika) és BUDALGGEO (algebrai geometria) EU-projektek keretében szintén megjöttek az első vendégkutatók. Így az intézet matematikus látogatóinak száma 2004-ben – konferencián résztvevőket nem számítva is – meghaladta a félszázat.

Az intézet által szervezett nemzetközi tudományos találkozók időrendi sorrendben az alábbiak voltak:

— *Conference on Extremal Combinatorics and workshop on Algebraic and Geometric Methods in Combinatorics*: egyhetes konferencia 2004 április 3-tól 8-ig 32 külföldi és 26 hazai résztvevővel, részben önállóan, részben a DIMACS (USA) – DIMATIA (Csehország) intézetekkel való együttműködés keretében. A közös, részben MTA-OTKA-NSF finanszírozású projekt a következő évben is folytatódik majd, egy-egy workshop szervezésével az összes résztvevő intézetnél.

- A *Floer Homology, Gauge Theory and Low Dimensional Topology* című háromhetes workshop 2004. június 6-tól 26-ig került megrendezésre, ugyancsak az Erdős Központtal közösen, összesen 103 külföldi és számos hazai résztvevővel.
- A CMI (Clay Math. Institute, USA) támogatásával rendezett konferencia és nyári iskola a jórészt az amerikai támogató által biztosított magas költségvetésnek köszönhetően neves külföldi előadók meghívását tette lehetővé. A találkozón (és a Rényi Intézet) rangját mutatja, hogy ez volt eddig az egyetlen nem az amerikai kontinensen szervezett CMI-szponzorált rendezvény.
- Csák Endre és Révész Pál 70. születésnapja adta az apropót a 2004. június 17-19. között 30-40 résztvevővel rendezett *International Conference on Probability and Statistics* című nagy sikerű találkozóra.

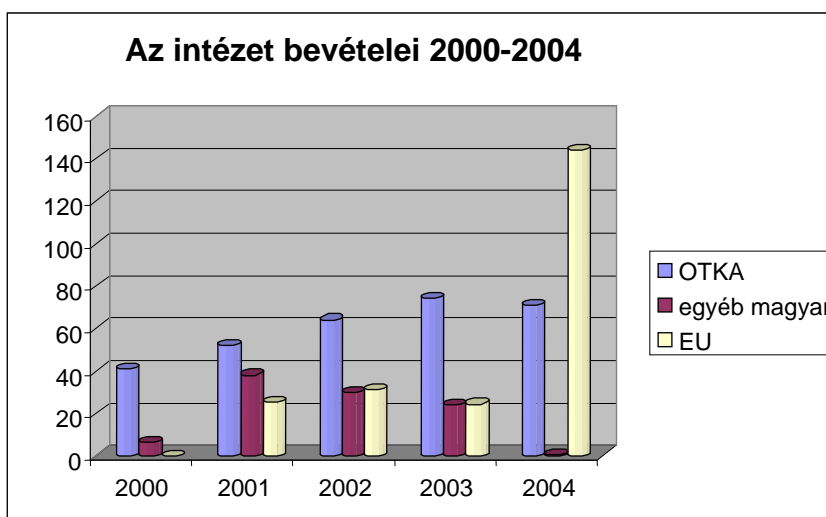
IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az intézet kutatócsoportjai továbbra is kiemelkedően szerepelnek az OTKA pályázatokon. Minden kutató legalább egy, de többnyire két projekt résztvevője, 2004-ben 8 új az intézethez telepített tematikus vagy fiatal kutatói pályázat nyert el 2005-től induló támogatást. Az egyéb hazai pályázati lehetőségek jelentősen szűkültek 2004-ben, bár az intézet kutatói számos további kisebb támogatást ilyen pályázatokon is szereztek.

Nemzetközi pályázatok

Az intézet kombinatorikai kutatócsoportja részt vesz az ún. DIMACS (USA) – DIMATIA (Csehország) – Rényi Intézet háromoldalú kutatási konzorciumban, melyet itthon az MTA-OTKA-NSF pályázati forma, az Egyesült Államokban az NSF támogat.



2004-ben az EU 6. Kutatás-Fejlesztési Keretprogramjában az intézet három pályázattal is sikeresen szerepelt a Transfer of Knowledge Marie Curie mobilitási típusú pályázatok között diszkrét matematikában (FIST), algebrai geometriában (BUDALGGEO) illetve konvex és diszkrét geometriában (DISCCONVGEO). Ezen projektek közül kettő már el is indult 2004-

ben. Jelentőségüket a presztízszen túlmenően az jelenti, hogy a következő négy évben külföldi (nem feltétlenül csak európai) kutatók meghívására mintegy 200 ember/hónap időtartamra biztosítják a pénzügyi keretet, továbbá a Rényi Intézet kutatói részére is biztosítanak külföldi vendégkutatási lehetőségeket.

Bár nyilvánvalóan az évek között természetes a számottevő ingadozás, de mindenképpen figyelemre méltó, hogy az intézet 2004-es európai uniós bevételei az előző évek 4-5-szörösére, 2003-hoz képest pedig egyenesen a hatszorosára nőttek, mint az a mellékelt diagramon is látható.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Tokushige N: The minimum area of convex lattice n -gons, *Combinatorica*, 24(2), 171-185 (2004)
2. Csiszár I, Narayan P: Secrecy capacities for multiple terminals, *IEEE Transactions on Information Theory*, 50(12), 3047-3061 (2004)
3. Domokos M, Lenagan TH: Representation rings of quantum groups, *Journal of Algebra*, 282(1), 103-128 (2004)
4. Füredi Z, Katona Z: Multiply intersecting families of sets, *Journal of Combinatorial Theory Series A*, 106(2), 315-326 (2004)
5. Juhász I, Shelah S, Soukup L, Szentmiklóssy Z: Cardinal sequences and Cohen real extensions, *Fundamenta Mathematicae*, 181(1), 75-88 (2004)
6. McEwan LJ, Némethi A: The zeta function of a quasi-ordinary singularity, *Compositio Mathematica*, 140(3), 667-682 (2004)
7. Agarwal PK, Nevo E, Pach J, Pinchasi R, Sharir M, Smorodinsky S: Lenses in arrangements of pseudo-circles and their applications, *journal of the ACM*, 51(2), 139-186 (2004)
8. Pyber L: Groups of intermediate subgroup growth and a problem of Grothendieck, *Duke Mathematical Journal*, 121(1), 169-188 (2004)
9. Goldfeld D, Lubotzky A, Pyber L: Counting congruence subgroups, *Acta Mathematica*, 193(1), 73-104 (2004)
10. Pappas A, Révész SG: Linear polarization constants of Hilbert spaces, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 300(1), 129-146 (2004)
11. Gao WD, Ruzsa IZ, Thangadurai R: Olson's constant for the group $Z_p \circledast Z_p$, *Journal of Combinatorial Theory Series A*, 107(1), 49-67 (2004)
12. Balogh J, Bollobás B, Simonovits M: The number of graphs without forbidden subgraphs, *Journal of Combinatorial Theory Series B*, 91(1), 1-24 (2004)
13. Lisca P, Stipsicz AI: Tight, not semi-fillable contact circle bundles, *Mathematische Annalen*, 328(1-2), 285-298 (2004)
14. Szamuely T: Groupes de Galois de corps de type fini (d'après Pop), *Asterisque*, 294, 403-431 (2004)
15. Marcus A, Tardos G: Excluded permutation matrices and the Stanley-Wilf conjecture, *Journal of Combinatorial Theory Series A*, 107(1), 153-160 (2004)

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	99	Ebből kutató ² :	69
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			13
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			149
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			147
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	88	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	12
nemzetközi együttműködés keretében:	81	SCI által regisztrált folyóiratban:	77
összesített impakt faktor:	50,686	összes hivatkozás száma ⁴ :	1569
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1174
Megjelent könyv:	6	könyvfejezet:	12
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	-
		jegyzet:	-
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	171	poszterek száma ⁶ :	-
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			32
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	82
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			546 MFt
Beruházási támogatás:	16 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	13
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			21
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	71 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,3 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			6
EU forrásból:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	35 MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			- MFt

SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

1111 Budapest, Kende u. 13-17, 1518 Budapest, Pf. 63.

Telefon: 279-6000, Fax: 466-7503,

e-mail: sztaki@sztaki.hu, honlap: <http://www.sztaki.hu/>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az MTA SZTAKI a tágan értelmezett informatika tudományának műhelye, az információ-technológia, számítástudomány és rokonterületei nemzeti kutatóbázisa. Elsősorban az informatika műszaki-tudományos és matematikai kérdéseivel foglalkozik, de figyelme kiterjed mindazon területre, amelyek ezekkel az alapkérdésekkel kapcsolatban állnak, azoknak ösztönzést, diszciplináris alapokat kölcsönözhetnek. Az alap- és alkalmazott kutatás széleskörű művelése mellett fontos feladat a megszerzett speciális ismeretek hasznosítása a kutatás-fejlesztés, rendszertervezés és rendszerintegrálás, tanácsadás, szoftverfejlesztés területén.

Az informatikai forradalom minden, az intézetben művelt témakör számára szinte naponta hoz új kihívásokat. Csak néhányat kiemelve: érzékelő számítógépek és távjelenlét, új típusú ember-gép kapcsolatok, bio-computing, molekuláris számítástudomány, komplex rendszerek modellezése, irányítása, felügyelete és diagnosztikája, elosztott számítási architektúrák, Grid-rendszerek, nagysebességű hálózatok és biztonsági kérdéseik, mobil kommunikáció, új WWW-technológiák, mérnöki visszafejtés, globalizált vállalatok informatikája, elektronikus kereskedelem, ágens-alapú struktúrák, minőségbiztosítás, pénzügyi menedzsment és kockázatanalízis, környezeti modellezés, de a sort folytathatnánk tovább. A felgyorsult világ bizonyos területeken a múltban megszokottól sokszor eltérő kutatási attitűdöt, szervezettséget és ezek kapcsán az eredmények másfajta értékelését követeli meg.

Alapelvük a nemzetközi mércével mérhető alapkutatás, az eredményeket alkalmazó, az itthon és külföldön hasznosítható informatikai fejlesztések és magas szintű tanácsadási tevékenység egymásra épülésének megteremtése, a tágabb tématerületen egy kiválósági központ megvalósítása, mely vonzó témákat és körülményeket biztosít a tehetséges fiatalok PhD tanulmányához, alkotó tevékenységük megkezdéséhez.

2004-re a hazai és nemzetközi jelenlétük és kisugárzásuk további növelését irányozták elő. A magas szintű tudományos eredmények elérése és publikálása, mint alapkövetelmény mellett a következőkre kívántak különös súlyt fektetni:

- Már megkezdett nemzetközi kutatási projektjeiknek az EU által adományozott Centre of Excellence kitüntető címhez méltó folytatása, eredményes lezárása. Sikeres szereplés a VI. Keretprogram első pályázati kiírásaiban.
- A Nemzeti Kutatás Fejlesztési Program terén elnyert jelentős számú projekt magas szintű folytatása, elméleti eredményeken alapuló, további felhasználásokat ígérő megoldások, rendszerek kifejlesztése.
- Az intézetben szokásos háromévenkénti, jelentősebb beszámolási-pályázati perióduson túlmenően, széleskörű intézeti megbeszélés sorozat eredményeképpen a kutatási portfólió áttekintése, megújítása.
- A nagyobb méretű, interdiszciplináris K+F projektek végzéséhez szükséges kapacitás elérése érdekében virtuális intézetek, virtuális laboratóriumok kialakítása, mind hazai, mind nemzetközi téren.

- A hazai és külföldi graduális és posztgraduális oktatásban betöltött eddigi jelentős szerepük fenntartása, fejlesztése, részben multimédiás, távoktatási módszerekkel.
- Jelenlétük erősítése, új partnerek megnyerése kutatás-fejlesztési, tanácsadási munkák végzésére olyan kiemelt hazai cégekkel, mint a Paksi Atomerőmű Rt, General Electric, Knorr Bremse, MOL, MATÁV és sikeres, feltörekvő vállalkozásokkal.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Matematika és számítástudomány

A kombinatorikus számítástudomány körébe tartozó gráfelméleti kutatásaik során meghatározták az út Ramsey számát 3 színnel történő színezés esetén, mely probléma harminc éven keresztül megoldatlan volt. Sikerült megvilágítani a véletlen metsző halmazrendszerek viselkedését és új eredmények születtek az identifying (ID) kódok elméletében. Az utóbbi esetben a véletlen hálózatok ID kódjainak az aszimptotikája került meghatározásra. Gráfok dominanciájának témakörében egy másfél évtizede nyitott problémát sikerült megoldani. Elkészült a teljes jellemzése az összefüggő gráfok egy adott osztálya által öröklődően dominált gráfoknak. Alsó és felső korlátokat adtak a fokszámfeltételeket kielégítő gráfcsúcspartíciót kereső, polinom idejű approximációs algoritmusok elérhető hatékonyságára.

Az operációkutatási témakörön belül új, a szinguláris érték dekompozícióra épülő eljárást és ahhoz kapcsolódó inkonzisztencia mértéket dolgoztak ki páros összehasonlítás mátrixokból nyerhető döntési súlyok meghatározására. A SIADCERO EU projekt keretében játékelméleti modelleket és módszereket dolgoztak ki a klímaváltozási tárgyalásokkal kapcsolatosan. Kritériumokat adtak legfeljebb 2-indexű, jól párosított kéttényezős főtagú lineáris differenciál-algebrai egyenlet peremérték-feladatának megoldhatóságára a fundamentális mátrix, illetve az adjungált egyenlet segítségével. Altman egy ismert fixpont tételét továbbfejlesztették és integrálegyenletek megoldására alkalmazták.

Új eredményeket értek el a csoportokkal kapcsolatos kvantumalgoritmusok terén. Csoportok szorzótáblájának tesztelésére kidolgoztak egy a tábla méretének logaritmusában polinomidejű módszert, amely nagy valószínűséggel felismeri azokat a szorzótáblákat, amelyek (alkalmas távolság szerint) távol vannak egy kommutatív csoport szorzótáblájától.

A nagyeltéréselmélet területén elért eredményeik alkalmasak nemparaméteres statisztikai tesztek hatékonyságának vizsgálatára. Több szempontból is vizsgálták az adattömörítés különböző módszereit. Kis számításigényű algoritmusokat készítettek, illetve vizsgáltak mind a veszteséges mind a veszteségmentes adattömörítés területén. Új eredményeket értek el az univerzális kódok, illetve az együttes csatorna- és forráskódok tervezésének területén.

A véges ponthalmazokon értelmezett polinomfüggvények egy érdekes bázisát (lex-standard bázis) sikerült egy kombinatorikai játék segítségével jellemezni. Ebből új elméleti eredményeket és egy igen gyors algoritmust kaptak.

Igen erős eredményeket értek el a Web gráf Monte Carlo módszerekkel való személyre szabott rangsorolásával és hasonlóságkereséssel kapcsolatban. Itt a hasonlósági mátrix kvadrátikus méretű, amelynek tárolása külső tárban sem megoldható gyakorlati feladatméret (százmillió vagy egymilliárd csúcs és tízszer ennyi él) esetén. A kimenet méretében szublineáris - és ezért valós méreteken is működő - algoritmusokat adtak a feladatok megoldására.

A *biológiai motivációjú számítástudományi* kutatásaik során érdemi eredményeket értek el a membrán rendszerek (P rendszerek) tanulmányozása során, amely konstrukciók a sejtmembrán architektúráját követő, működésük során az élő sejt kommunikációs viselkedését utánozó kiszámítási eszközök. Meghatározták több, működési mechanizmusában eltérő P rendszer kiszámítási osztály erejét és az ezen erő eléréséhez szükséges minimális méretparaméterek nagyságát. Ilyen rendszerek például az ún. sarjadzó membrán rendszerek, vagy az elméletben kiemelkedő fontosságú, egy-, illetve kétirányú kommunikációt megvalósító, ún. szimport/antiport szabályokkal rendelkező rendszerek. Meghatározták továbbá a P automaták, azaz az elfogadó membrán rendszerek különböző változatai által meghatározott Turing kiszámítási osztályokat és így új lehetőségeket tártak fel a természetes rendszerek viselkedésének leírásában.

A *multi-ágens rendszerek formális nyelvi modellezése* terén 2004-ben elsősorban a kooperáló, probléma megoldó ágensek együtteseinek modellezésére szolgáló kooperatív osztott grammatikákra koncentráltak. Összehasonlították különböző, az egyes ágensek kompetenciáján alapuló együttműködési stratégiákat használó modellek kiszámítási erejét és méretbonyolultságát, az együttműködési stratégiák jellemzőit és hatékonyságát, valamint hatékony szintaktikai elemzőket hoztak létre ezen grammatikarendszerek egyes változatai alapján.

A *penzügyi matematikai kutatásaik* fő irányai: opcióárazás, viselkedési modellek és részvényárfolyamok elemzése. Jelentős előrelépés az opcióárazás és az optimális portfólió kapcsolatának a kidolgozása. Létrehoztak egy új, hiedelem-alapú sztochasztikus tőzsde-modellt, vizsgálták az egyensúlyi állapot kialakulásának feltételeit és alkalmazták a Budapesti Értéktőzsde szimulációjára. Új eljárást dolgoztak ki részvényárfolyamok log-hozamának elemzésére, különösen strukturális változások detektálására az ún. GARCH folyamatok körében. További eredmény egy új modell és eljárás kidolgozása log-optimális deviza-portfóliók tervezésére. Sztochasztikus modellt dolgoztak ki a magyar Diákhitel rendszer fenntarthatóságának a vizsgálatára a kockázati prémium és a visszafizetési hányad függvényében.

A pénzügyi matematikai kutatások háttérét részben a sztochasztikus rendszerek körében végzett általánosabb irányú kutatások biztosították: rejtett Markov-folyamatok statisztikai vizsgálata, rekurzív becslések, és Markov lánc Monte Carlo módszerek.

A *gépi tanulás* témakörében kidolgoztak és sikeresen alkalmaztak több feladatra is egy tulajdonság kinyerő eljárást, amely mind regressziós, mind klasszifikációs probléma esetén a korábbi eljárásoknál jobb eredménnyel képes tulajdonságkinyerésre. Az eljárás az ismert LDA eljárást általánosítja, s lényege, hogy a tulajdonságokat egyesével nyeri ki, úgy, hogy minden lépésben az újonnan kinyert tulajdonság az, amely maximálisan informatív a korábban kinyert tulajdonságoktól eltérő (azokra “merőleges”) tulajdonságok között.

A *megerősítő tanulás* témakörében kidolgozták az ún. Q-tanulás egy változatát, amelyről, szemben a korábban mások által javasolt alternatívákkal, bebizonyítható, hogy folytonos állapotterekben is stabilan képes működni. A nemlineáris sztochasztikus rendszerek szűrésére kidolgozták a particle filter-ek egy olyan módosítását, amely lényegesen csökkenti az állapotbecslések szórását abban a nagy gyakorlati jelentőségű esetben, amikor a megfigyelések zaja lényegesen kisebb a dinamika “zajához” képest.

A *keresési algoritmusok* témakörében definiálták és vizsgálták egy új feladatot, amelyre algoritmikus megoldást is adtak. Az új feladat, a “legrövidebb utak felfedezésének problémája”, olyan gyakorlati problémákban lép fel, amikor a keresési gráfban a költségek

kezdetben nem ismertek, s ezek lekérdezése költséges: a feladat olyan algoritmust adni, ami a lehető legkisebb költséggel képes megtalálni a gráfbeli legrövidebb utat.

Az egyes főbb területek mind tematikai, mind személyi szempontból átlapolódnak, de többé-kevésbé kimondható, hogy a matematika-számítástudomány témakörben mintegy 40 kutató dolgozik az intézetben. A becsült intézeti ráfordítás mintegy 231 millió Forint volt, melynek 42%-a pályázati forrás. Elsősorban az operációkutatással és a sztochasztikus rendszerekkel (beleértve a pénzügyi matematika területét is) kapcsolatos eredmények hoznak gazdasági hasznot. Az operációkutatással foglalkozó laboratórium és osztály környezeti modellezéssel kapcsolatos kutatásai és projektjei közvetlenül hozzájárulnak a hazai életminőség javításához. Az eredmények hasznosítása elsősorban intézeti keretek között folyik.

Informatika

Az *analogikai és neurális számítógépek* terén az analogikai celluláris számítógépek paradigmára építve, a hullám alapú algoritmusok, érzékelő-számítógépek és neuromorf modellek területén 2004-ben az alábbi fontosabb új eredmények születtek:

- Új algoritmikus platformot dolgoztak ki a multimodális érzékelés és navigáció tipikus feladataira, különös tekintettel a földfelszín elemzésére.
- Csatolt oszcillátorok Celluláris Nemlineáris Hálózatának kvalitatív elméletében megmagyaráztak egy új szinkronizációs jelenséget és ehhez kapcsolódó mintázat formálódást.
- Az optikai CNN implementáció terén egy adatbiztonsági hardware-software algoritmust dolgoztak ki.
- Tér-időbeli kaotikus attraktorokat találtak morfológiai jelenségek detektálására, amelyek a vizuális mikroprocesszorokon is implementálhatók.
- Ütközésselkerülésre új analogikai celluláris algoritmusokat adtak.
- A biometriai azonosítás néhány új, analogikai algoritmusát dolgozták ki.

Az *analogikai számítógépek* alkalmazásához tartoznak a következő alkalmazási eredmények:

- A háromdimenziós echokardiográfiai rendszert sikerrel alkalmazták gyermek szív-műtétek előkészítésére a Gottsegen György Országos Kardiológiai Intézet Gyermekszív Központjában.
- Sokkamerás rendszerekben sikerült épületbiztonsági figyelemfelhívó rendszert sikeresen telepíteni.
- Többcélpontos követés lézeres rendszerét dolgozták ki.

A *kognitív látás* témakörében tanulmányozták az emlősállatok (köztük a macskák, majmok és az ember) látással foglalkozó agyi területeit, a retinától az agykéreg hátsó (V1) lebenyéig. Információ-feldolgozás szempontjából modellezték a megvizsgált biológiai rendszereket. A felállított modell az agykéreghez hasonlóan egy neurális hálózat, amely képes a képi információ alapján a képi kontúrok intelligens felismerésére. Így bizonyos orientációjú és hosszú szakaszok, görbék, egyszerű alakzatok felismerése lehetővé válik. A modell tisztán neurális alapokon nyugszik, a kontúrozási feladat végrehajtása nem igényel algoritmust.

Az *intelligens tér* koncepción alapuló elosztott, multiszenzoros (többkamerás) mozgáskövető rendszert készítettek. A rendszer ipari környezetbe integrálható. A számos potenciális alkalmazási terület közül a kifejlesztett rendszert ipari robotok gyors és hatékony programozására használták. A rendszert bemutatták a Magyar Innovációs Szövetség által szervezett Innofórumon. Valós ipari környezetbe ágyazva a rendszer a legnagyobb norvég kutatóintézet, a SINTEF által szervezett bemutatón is sikeresen szerepelt 2004 áprilisában.

Világszerte egyre nagyobb az érdeklődés az új harmadik generációs, szolgáltatás alapú *Grid rendszerek* iránt. Az intézet kulcsszereplője több hazai és nemzetközi kutatási projektnek. A 2004-es eredmények közül kiemelendők a következők:

- Integrált P-GRADE párhuzamos Grid programfejlesztő rendszer kidolgozása a korábbi sokféle eredmények ötvözésével. A Klaszter Griden tetszőlegesen hosszan futó programok támogatása a P-GRADE ellenőrzőpont-készítési mechanizmusával.
- A P-GRADE rendszer portál verziójának kidolgozása.
- EGEE Grid rendszer adaptálása és kiterjesztése a P-GRADE portállal ill. a Mercury monitorral. Az EGEE alapú Grid rendszert kiszolgáló P-GRADE portál szerver üzembe helyezése.
- JiniGrid rendszer prototípusának kidolgozása.
- SETI-szerű Grid rendszer specifikálása.
- Együttműködés a UK e-science OGSA testbed projekttel.
- A P-GRADE portál kollaboratív verziójának specifikálása.

Vonatkozó elméleti és alkalmazott kutatási tevékenységük célja, hogy olyan nemzeti tudásközponttá váljanak a hálózati és szöveges adatbányászat és a webes keresés területén, amely európai szintű kutatóhellyé fejlődhet. A webkeresés témájában a kutatás az Egyesült Államokban néhány egyetem (Stanford) és kereső cég (Microsoft, Google, Yahoo) köré koncentrálódik. A kutatásból nemcsak Magyarország, de talán Európa egésze is némileg kimarad. Céljuk, hogy ezt az űrt európai szinten egy magyar kezdeményezés töltsse be, amely ellátja a hazai vállalkozásokat a szükséges tudásháttérrel. Miközben a magyar nyelv elenyésző hányadát jelenti az egész Világhálónak, igen bonyolult szintaktikája miatt jelentős kihívást jelent a keresők készítőinek. A keresés során a nyelvi eszközök és a rangsoroló eljárások szoros együttműködésére van szükség. Ebben sikerült érdemi eredményeket elérniük.

Kutatás-fejlesztési feladataikat az Axelero Rt., az Econet.hu, a Matáv Rt., a Richter Gedeon Rt. és hazai kis- és középvállalkozások (Pont Rendszerház és Omega Consulting) együttműködésével végzik. Az Axelero Rt. és az Econet.hu a webes naplóállományok és a webes felhasználói szokások vizsgálatában partnerük. A Matáv Rt. az általuk fejlesztett magyar nyelvű keresőrendszer első felhasználója, a híváshálózatok vizsgálatában partnerük, valamint a Pont Rendszerház és Omega Consulting mellett a szöveges adatbányászati K+F eredmények kísérleti terepe. Klaszterező és hasonlóságkeresési eredményeiket a Richter Gedeon Rt. alkalmazza a gyógyszerkutatásban.

Elkészült egy nagyméretű telekommunikációs és web szerver naplóállományokat vizsgáló szoftver keretrendszer és annak bizonyos moduljai. Céljuk egy olyan eszköz elkészítése volt, amely alkalmas a nagyobb internetes oldalak látogatóinak szokásainak vizsgálatára. Kísérleteikben a legnagyobb magyar portál, az origo weblogjait használták fel.

Az intézet a hazai *eLearning* piac meghatározó szereplője lett. Küldetésükkel összhangban nagy hangsúlyt fektetnek arra, hogy a multimédia technológiák kutatása és alkalmazása terén szerzett nemzetközi tapasztalatokat hazai projekteken is alkalmazzák.

Adaptív Multimédia Technológiák kutatása terén céljuk a standard oktatási keretrendszerek, az általuk kifejlesztett szabványos tananyag adatbázis és az ADMS (Adaptív elosztott multimédia szerver, Klagenfurt) platform összekombinálásával egy adaptív képzésmenedzsment platform kifejlesztése és alkalmazása a hazai egyetemi-kutatói közösség számára. Az általános szakértői tevékenység mellett végzett konkrét programfejlesztési tevékenységük eredményeként a következő termékeket hozták létre:

- SZTAKI eLibrary: szabványos SCORM formátumú komplett tananyagcsomagok menedzselésére szolgál.
- SZTAKI SCORM eDBMS: az önálló tanulási egységek szintjére lebontott tananyag elemek és a tananyag struktúra menedzselését támogatja.
- SZTAKI SCORM Tester: szabványos SCORM tananyagcsomagok tesztelését támogatja.
- SZTAKI SCORM Viewer: szabványos tananyag csomagok struktúrájának értelmezéséhez és a tananyag oldalak megtekintéséhez.
- MTA SZTAKI SSS® az egyetemi és konferencia előadások reprodukív ismétlésének támogatásához kifejlesztett és védjegyoltalomra bejelentett „Synchron Slide & Stream” elektronikus tananyag-fejlesztési technológia. Lényege, hogy a tananyag egy osztott képernyővel jelenik meg, amely tartalmazza mind az előadó által vetített előadás-fóliákat, mind az előadásról készült videó felvételt. A hallgató szabadon pozícionálhat mind a slide-okban, mind a video streamben, a két objektum egymással szinkronban mozog.

Kiemelt üzleti kapcsolatot alakítottak ki az SAP Magyarországgal, mellyel tartalomfejlesztési együttműködési szerződést kötöttek. Sikeres bemutatók eredményeként szerződés-előkészítő tárgyalásokat folytatnak a Paksi Atomerőmű Vállalatnál, ahol a belső képzésekhez terveznek közös tananyag fejlesztést a fenti technológiák alkalmazásával. Számos hazai intézménnyel van szerződéses kapcsolatuk.

Multimédiás fejlesztési munkáik során céljuk olyan speciális berendezések fejlesztése, melyek a legújabb infokommunikációs eszközöket adaptálva képesek értékes mozgó filmek megmentésére. 2004-es kiemelkedő eredményeink főleg a DIMORF NKFP-projektrel kapcsolatosak, ahol a Veszprémi Egyetem Képfeldolgozási Tanszékével, a Magyar Nemzeti Filmarchívummal és a Cortex Kft.-vel dolgoztak közösen. Az intézet főbb hozzájárulása a következőképpen összegezhető:

- Nagyfelbontású 35 mm-es film szkennerek, archív filmek számára. A 6 K (6000 dpi, 4 um) felbontás, a 12-14 bit R,G,B,I szín mélység, a 2K-s hangcsík digitalizálás, a 10 másodperces képdigitalizálási idő, a hidegfényű megvilágítás és a perforáció nélküli precíziós filmtovábbítás a berendezést világszínvonalúvá teszik. A teljes adatáramlási sebesség eléri a 35 MBps-ot.
- Nagyfelbontású 35 mm-es, lézeres filmíró, digitálisan felújított filmek mentésére. A 6 K (6000 dpi, 4 um) felbontás, a 12 bit R,G,B szín mélység, a 0,6K-s hangcsík felírás, a 10 másodperces kép felírási idő, és a perforációmérés alapú precíziós filmtovábbítás, szintén olyan paraméterek, melyek a berendezést világszínvonalúvá teszik. Egyedi, szabadalmaztatás alatt álló, a forgófejes, belső dobos megoldás, mely lehetővé teszi, a teljes 35 mm-es film felírását, elhanyagolható geometriai torzítással.
- Nagysebességű RAID-es 4 TB-os tároló rendszer Gigabites hálózattal.
- Szabadalmaztatott, DRASTI védjeggyel ellátott digitális film hangcsík leolvasó rendszer. A képfeldolgozáson alapuló rendszerüket további modulokkal egészítették ki, mely így alkalmas, pozitív és negatív hangsáv digitális tisztítására, donner korrekcióval.

A 2004-es év jelentős és látványos eredménye az első magyar színes film a „Ludas Matyi” digitális felújítása volt a Magyar Filmlaboratóriummal közösen.

A TRAMIR IKTA-projektben Országos Baleseti és Sürgősségi Intézettel és az ALL kft-vel vesznek részt. Célja a politraumás ellátás segítése multimédiás eszközökkel, a diagnosztizálási idő csökkentése érdekében. Az egyik legfontosabb feladat a hagyományos röntgen kép digitalizálása, eljuttatása a szükséges helyekre és archiválása. A DIMORF

filmszkenner főbb elemeit felhasználva kifejlesztették a RADRAST röntgenfilm digitalizálót, melynek paraméterei kiválóak. A projektben elért eredmények rendszerben és önállóan is alkalmazhatóak más egészségügyi intézményekben.

Szintén kiemelt tevékenységi területük a *hálózatbiztonsági rendszerek és felügyelet* fejlesztése. 2002 januárjától folyamatosan zajlik az a munka, amit a CERT – Computer Emergency Response Team – betűszóval jellemezhetünk. Az ISZT- IHM-MTA támogatásával zajló munka során hálózat biztonsági feladatokat látnak el az ISZT, MTA tagok, vagyis a magyarországi internet szolgáltatók és felhasználók érdekében. A magyar kormányzati CERT jelenleg folyó kialakítása, valamint majdani üzemeltetése során, kiemelt partnerként tevékenykednek. Az EU felismerve a hálózati biztonság témakörének fontosságát, a közelmúltban megalakította az ENISA-t (European Network and Information Security Agency). Az IHM munkatársai alelnöki, illetve ügyvivői szerepet töltenek be az ENISA-ban, az intézet munkatársai számukra szakértői segítséget nyújtanak.

A *könyvtári informatika* terén továbbfejlesztették két könyvtár-automatizálási programcsomagjukat: a *KisTékát* a kisebb, a *HunTékát* pedig közepes és nagyobb méretű könyvtárak számára, hogy mindinkább megfeleljen a magyarországi könyvtári szabványoknak és új elvárásainak. 2004 végén már 56 könyvtár (32 kisTéka, 26 HunTéka) használja a rendszereket, közöttük határon túli könyvtár is szerepel.

Az intézet ad otthont a *World Wide Web Consortium Magyar Irodájának* 2002. szeptemberétől kezdve. Külön kiemelendő, hogy 2004-ben az Informatikai Minisztérium támogatással elindultak 12 db nemzetközi webes szabvány (RDF és OWL W3C szabványcsokor) hazai honosítási munkálatai. A honosítás tervezett befejezési határideje 2005, ezáltal remény van arra, hogy Magyarország e téren úttörő szerepet játszik.

Az *elosztott rendszerek* témakörben elért további eredményeik közül kiemelésre érdemesek a következők:

- World Wide Web alapú szoftver technológia kutatások és kísérleti fejlesztések, digitális könyvtári rendszerek és szolgáltatások valamint csoportszoftver (groupware) kutatása-fejlesztése.
- GeneSyS: Generic Systems Supervision (IST-2001-34162, 2002-2004) kutatási projekt Web technológiákon és ágens rendszeren alapuló rendszermonitorozás célú middleware kifejlesztését célozta meg az úrkutatási és hadiipar számára.
- A HEKTÁR projekt keretében létrejött kutatási eredmények továbbfejlesztése alapján, alkalmazásba vitel révén létrehozták egy, az NDA (Nemzeti Digitális Adattár) projekt által kialakított metadatsémák alapján működő OAI alapú közös kereső nyílt internetes szolgáltatást digitalizált kulturális javak keresésére. A rendszer az év végén több mint fél millió rekordot tartalmazott 12 db különböző hazai memória intézmény (könyvtár, gyűjtemények, stb.) audio-vizuális archívumait összekapcsolva.
- A KOPI projekt eredményeképpen hazánkban először jött létre nyílt internetes plágium kereső szolgáltatás, mely révén az egyetemi és középiskolai szférában visszaszoríthatóvá válhatnak a jelenlegi disszertáció-másolási jelenségek ugyanakkor a kidolgozott technológia más, a kommerciális szférában való alkalmazása előtt is megnyílik az út (pl. copyright management).
- A DELOS NoE: Network of Excellence on Digital Libraries digitális könyvtári kutatási kiválósági hálózatmunkáján belül a digitális könyvtárak értékelését és architektúráis kutatását végzik.

- INFRAWEBBS néven indult új nemzetközi projektjünkben a szemantikus web szolgáltatások keresése, végrehajtása és a felhasználói interfész menedzselés működési modellek és implementációk kialakítása a feladatuk. A 3 évre tervezett projektben erőteljes alapkutatás mellett konkrét pilot implementációt is megcéloltak.

A számítógép hálózati rendszerek kialakítása, tervezése, üzemeltetése, valamint a kapcsolódó tanácsadási tevékenység során több jelentős hazai céget, szervezetet érintő eredményeket értek el:

- A hazai kutatói hálózatban a VoIP technológia alapján működő hangszolgáltatás jelentős kibővítése, a hangszolgáltatás riasztási, statisztikai elemeinek a kidolgozása, alacsonysebességű VoIP kapcsolatok lehetőségeinek a feltérképezése.
- LDAP névtár alapú országos infrastruktúra bővítése.
- Linux Cluster alapú Internet szolgáltatói platform kialakítása és üzembeállítása, kiegészítve SPAM és víruszűrési eljárásokkal.
- A hazai optikai Internet hálózat 10Gbps és DWDM bővítése.
- Web technológiájú hálózat és rendszer felügyeleti keretrendszer kialakítása.
- Virtuális hálózat felügyeleti rendszer kialakítása.
- 802.1X alapú autentikációs és autorizációs módszerek kidolgozása.

Távközlési és térinformatikai területen fő tevékenységi irányként a műholdas szolgáltatások és a távközlés ötvözése során kialakuló új alkalmazási területeket jelölték meg. Ezen belül fő cél részvételük az európai kezdeményezésként 2008-ban üzembeálló Galileo program előkészítésében, valamint a szükséges tudásbázis felépítése és nemzetközi kapcsolatok kialakítása volt. Ennek jegyében a részt vettek a VERT konzorcium munkájában, amely a műholdas szolgáltatásokra épülő közlekedési információs rendszerek vizsgálatát és az útdíjszedés lehetőségeinek elemzését, valamint ezt demonstrálandó egy pilot-rendszer kialakítását végzi.

A múlt emlékeinek érdekes bemutatási lehetősége a virtuális rekonstrukció. Az önálló ötletből fejlesztett kronoszkópba betekintve a rommező látogatója előtt megjelennek az ókori épületek, a látható romok helyén megjelenítve. A világon egyedülálló projekt fejlesztése folyik, a kronoszkópok 2005 tavaszától az Aquincumi Múzeumban lesznek láthatók.

A tágabb értelemben vett informatikai témakörben mintegy 120 kutató dolgozik az intézetben. A becsült intézeti ráfordítás mintegy 1.281 millió Forint volt, melynek 45%-a pályázati forrás. A gazdasági haszonszerzés, illetve haszonszerzési képesség tágabb tématerületenként a következőképpen összegezhető:

- *Analogikai és neurális számítógépek:* a potenciális felhasználási területek (orvosi, ipari, űrkutatási, hadi, stb.) szinte beláthatatlanok. A hasznosítást részben az intézet, részben az Analogic Kft végzi.
- *Kognitív látás, intelligens tér:* hasznosítás középtávon elképzelhető.
- *Grid rendszerek:* Az intézet rész vesz a különböző irányultságú, legfontosabb európai és hazai kutatási, felhasználási projekteken. A kapcsolódó szaktanácsadás, szolgáltatás nyújtás terén jelentős bevétel várható.
- *Adatbányászat, webes keresés:* a témakör a fenti összefoglaló szerinti jelentős ipari érdeklődést, együttműködést, felhasználást tud felmutatni (Matáv Rt, Axelero Rt, Econet, Richter Gedeon Rt, Pont Rendszerház, stb.), további nagymértékű piaci bevételt sejtetve.
- *eLearning:* Kifejlesztésre kerültek azok a technológiák, melyekkel a siker eséllyel lehet folytatni a várhatóan növekvő piacért folyó versenyt.

- *Multimédia fejlesztések és alkalmazások*: NKFP-projekt keretében világszínvonalú hw-sw eszközrendszer került kifejlesztésre. A „Ludas Matyi” című film digitális felújítása jelentős siker. A potenciális értékesítés egyrészt szolgáltatás, másrészt a know-how értékesítése révén képzelhető el. Fontos piaci szegmens lehet a multimédiás eszközök orvosi felhasználása.
- *Hálózatbiztonsági rendszerek terén*: az intézet szakértői szerepet vállalt az IHM-ben, melyet – reményeik szerint – megrendelések követhetnek mind az állami, mind a privát szektorból.
- *Könyvtári informatika*: jelentős gazdasági értékelésről tudnak már ma is számot adni.
- *Elosztott rendszerek*: nagymértékű bevételt tudnak már ma is felmutatni.

A hasznosításokat részben az intézet látja el, részben – szerződések alapján – informatikai kisvállalatok végzik. Az informatika bevezetése a bővebb leírásban szereplő összes területen a versenyképesség erősítésével és az életminőség növelésével jár együtt.

Automatizált irányítási rendszerek

Az automatizált irányítási rendszerek elméleti és módszertani háttérét a *rendszer és irányítás elmélet* adja. E területen a kiemelendő eredmények a következők:

- Kiterjesztették az időinvariáns geometriai rendszerelmélet eszközeit időben változó paraméterű lineáris modellstruktúrákra, az ún. LPV modellekre és így sikerült módszert adni bizonyos LPV rendszerosztályok hibadetektáló szűrőinek tervezésére, valamint dinamikus rendszer-invertáláson alapuló szabályozók tervezésére .
- A szakaszonként lineáris kapcsolt hibrid rendszerek (switching linear hybrid systems) a hibrid nemlineáris rendszerek egy széles, a gyakorlati alkalmazások szempontjából fontos osztályának leírására alkalmas. Lineáris mátrixelméleti módszereken alapuló módszert fejlesztettek ki ezen rendszerosztály irányíthatóságának vizsgálatára.
- Az elektronikus fék és a keresztstabilizátor kombinálásával módszert fejlesztettek ki hasznójárművek kanyarodási stabilitását növelő irányítási stratégia tervezésére és megvalósítására. A tervezés lineáris paraméterváltozós módszerrel történt, amelyben a minőségi előírásokon kívül a lehetséges meghibásodási eseteket is számításba vették.

A *Paksi Atomerőmű* mind a négy blokkján üzemen állították a véglegesített és egységesített, UTS nevű elosztott számítógépes rendszert, amelyet az elmúlt években fejlesztettek ki reaktorvédelmi rendszer tesztelésére. A teljes körű üzemi tapasztalatok szerint mind a normál működés közbeni tesztek, mind a főjavítások utáni ellenőrzések ideje lényegesen lerövidült, amivel a tesztelés folyamata és kiértékelése biztonságosabbá vált, és csökkent az indokolatlan blokkleállítás valószínűsége.

A COSMOS projekt keretében kifejlesztették a *Paksi Atomerőmű* reaktorvédelmi rendszerének (RVR) belső állapotinformációi alapján végzett hibadiagnosztizáló rendszert. A diagnosztikai eszköz képet alkot - a blokkszámítógépen rendelkezésre álló információk felhasználásával - az egyes RVR funkciók hibás vagy degradálódott állapotáról. A felállított hibamodellek kiértékelése után számszerűen meghatározható a reaktorvédelmi rendszer degradációjának foka, amely mutató fontos tájékoztatást jelent a biztonsági rendszerben bekövetkezett hibaesemény súlyára vonatkozólag.

A *KNORR BREMSE*-vel és a *BME*-vel gépjárművek új irányítási és navigációs rendszerének kidolgozásával foglalkoznak. A flotta irányítás központja a SZTAKI-ban működik, míg a fedélzeti adatgyűjtést, kommunikációt és irányítást végző rendszereket a *KNORR BREMSE*

kamionjaira telepítették. A rendszerek lehetővé teszik a flotta számára nemcsak az egyes járművek és berendezéseiknek irányítását, távdiagnosztikáját, hanem a flották számára az útvonaltervezést, optimalizálást, az útviszonyoknak megfelelő dinamikus átutemeztést és a járműkövetést is. A rendszer funkciókat a BME térinformatikával is kiegészíti.

A geometriai modellezés és számítógépes látás területén elért eredmények közül kiemelendők:

- Kidolgoztak egy újszerű, robusztus eljárást mozgásalapú, háromdimenziós szegmentálásra és alakzat-rekonstrukcióra.
- Új genetikai algoritmusokat adtak képek és felületek regisztrálására, valamint részleges háromdimenziós modellek regisztrálására.
- Új módszer született dinamikus (mozgó) textúrák leírására és felismerésére.
- A korábban ismert, síkbeli poligonokra érvényes súlyponti koordináta-konstrukciókat (az ún. diszkrét harmonikus koordinátákat), egy közös súlycsalád speciális eseteként állították elő és tetszőleges dimenzióra általánosították.
- Térdizületek vizsgálatára irányuló projekt keretében eljárást fejlesztettek ki az izületi tengely számítására, valamint módszert dolgoztak ki az érintkezési pont térbeli pályájának MR képek alapján történő meghatározására.

A *bioinformatika* témakörébe tartozik „A térdizület számítógépes megjelenítésén alapuló stereotaxisos és navigációs műtéti eljárások” című NKFP-projekt. Itt a cél a térdizület anatómiájának és elváltozásainak alaki megjelenítése, helyének meghatározása képalkotó vizsgálattal nyert adatállomány segítségével. Digitalizált adatállomány rekonstruálja a valósághű anatómiai három dimenziós képet. A képernyőn megjelenő területek fizikai megközelítése szimulációs rendszer segítségével történik. Az operatív műveleteket részben stereotaxisos, részben videokamerás digitalizáló módszerek támogatják. A vizsgálatok lehetővé teszik a minimál sebészeti eljárások kiterjesztését elsősorban a térd vonatkozásában, de a program más orvosi területen is felhasználást nyerhet. A három dimenziós mozgásokat megvalósító térdizületi protézis behelyezését pontosítja, de különösképpen az ún. monocondyláris - csak az egyik izületi oldalt pótló - protézisét. Jelenleg erre speciális műszerkészlet nem kapható. Ennek a módszernek az orvosi gyakorlatban igen nagy jelentősége van és ezen túlmenően komoly gazdasági haszna is, ha csak arra gondolunk, hogy egy a kialakítandó szoftverhez hasonlatos csomag ára 80 millió forint.

A mérnöki és üzleti intelligencia tématerületen

- Kidolgoztak egy általános célú erőforrás-korlátos projekt ütemezési modellt, amellyel az ütemezési problémák egy nagy osztályába eső feladatai jó közelítéssel leírhatók. Új, vágósíkokkal működő lineáris megoldó rendszert fejlesztettek ki, amellyel nagyméretű feladatok is hatékonyan megoldhatók.
- A termeléstervezési és ütemezési problémák egy olyan új, projekt-alapú megközelítését adták, amely egyesíti a tervezés eddig hagyományosan szétválasztva kezelt erőforrás-orientált ill. anyagáram-orientált aspektusait.
- A korlátozás programozás paradigmáján belül hatékony keresési és optimalizációs algoritmusokat dolgoztak ki, amelyek lehetővé teszik a puha és kemény korlátok által definiált feladatok megoldását és a több-kritériumú (Pareto) optimalizálást is.
- A korlátozás programozás általános megoldási stratégiáját kiegészítették úgy, hogy a megoldó a keresés során bármikor új, külső tanácsot is tud kezelni új korlátozások formájában és ezeknek a korlátoknak a teljes megoldástérben érvényt tud szerezni. Ezzel

az interaktív megoldóval javaslatot tettek az együttes emberi és gépi feladatmegoldás egy újszerű, a gyakorlatban is használható modelljére.

- Hiányos adatokat is kezelni tudó mesterséges neurális háló modell tanító és alkalmazási algoritmusait fejlesztették ki.
- Adaptív, öntanuló ágenseket vezettek be a termelésütemezésben és ez irányú eredményeiket európai projekt keretében alkalmazták. Megerősítéses tanuláson, szimulált hűtően és mesterséges neurális hálókön alapuló algoritmusuk jelentősen növeli az elosztott termelési struktúrák hatékonyságát és - kordában tartva a kommunikációs és számítási igényeket - jó scale-up tulajdonságokkal rendelkezik.
- Kidolgoztak egy nagy rendszermodellek lebontását végző algoritmust és azonosították a gyakorlati felhasználáshoz szükséges elsődleges kérdéseket, problémákat.

A *Digitális vállalatok, termelési hálózatok* NKFP-projekt ipari prototípushoz/bevezetéshez vezető K+F eredményeik közül a következő, a projektben fő ipari partnerként szereplő GE Hungary-ban történő bevezetésén kívül, szélesebb körű felhasználásra is számító rendszereket emeljük ki:

- PROTERV: projekt-orientált termelés-és kapacitástervező rendszer,
- PROTERV-H: integrált termelés-tervező és ütemező rendszer,
- IMUTA: interaktív multimédia és távjelenlét keretrendszer,
- INDOK: intelligens dokumentum fejlesztés,
- M²ATRIX: gyártósorokat felügyeleti szempontból is szimuláló rendszer,
- PRODMOD: rendszer termelési összefüggések intelligens feltárására.

A *számítógéppel integrált gyártás* terén újfajta, internet alapú e-megoldásokat dolgoztak ki kis- és közepes vállalatok elosztott tervező- és termelő hálózatainak működtetésére. Szintén európai projektek keretében nyújtottak hálózat-alapú támogatást különböző területeken működő SME partnerscsoportoknak. Három további nyertes projekt kapcsán (COSPA, FOKsai és P2P) komoly kutatómunka indult egyrészt a nyílt szoftverrendszerek, másrészt különféle tudáskezelési megoldások valós (kis)vállalati és egyéb (irodai) felhasználásának a területén. Egy olyan tudáskezelőt fejlesztenek, amely négy különböző ipari területen segíti a „környezeti intelligencia” tulajdonságokkal rendelkező rendszerek működését.

Az automatizált irányítási rendszerek témakörben mintegy 50 kutató dolgozik az intézetben. Az intézeti ráfordítás 775 millió Forintra tehető, melynek 44%-a pályázati forrás. A gazdasági hasznosítás, illetve hasznosítási képesség az alábbiakkal jellemezhető:

- *Rendszer- és irányításelmélet*: Kiemelkedő partnerként a Paksi Atomerőmű említhető, vitális fontossággal bír, hogy a területen magas szintű elméleti munkán alapuló hazai alkalmazási eredmények jönnek létre és rendelkezésre áll az a szükséges know-how, mely hozzájárul ahhoz, hogy az Atomerőmű biztonságosabban és hatékonyabban tudjon működni és kevésbé legyen kiszolgáltatott helyzetben külföldi partnereivel szemben. Az intelligens gépjármű-irányítási kutatások mind a hazai autóipar, mind az egyre fontosabbá váló logisztika szempontjából kiemelkedő fontosságú téma.
- *Geometriai modellezés és számítógépes látás*: A világszerte elismert, jórészt egy spin-off-on (CADMUS) keresztül hasznosított műszaki eredmények után - az idézett NKFP-projekt hatására - várhatóan megnyílik a bioinformatika terén is a hasznosítási lehetőség.
- *Mérnöki és üzleti intelligencia, számítógéppel integrált gyártás, digitális vállalatok, termelési hálózatok informatikája*: A kidolgozott sw rendszerek bevezetés alatt vannak a GE Hungary több gyárában és várhatóan sikerrel alkalmazhatóak más – esetleg jóval kisebb – cégeknél is. A fenti területeken elért eredmények elengedhetetlenek a hazai

vállalatok versenyképességének javításához. A további kutatómunkát újabb NKFP projekt támogatja. A kifejlesztett eszközök piacra vitele, a gyárak által megkívánt további szolgáltatások várhatóan megkövetelik egy spin-off megalakítását.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Nemzetközi kapcsolatok

Nemzetközi kapcsolataik közül elsőként az EU kitüntető *Centre of Excellence* címét kell említenünk. A címhez méltóan szerepeltek az EU V. Keretprogramjában, ahol mintegy 30 projektben, illetve kiválósági hálózatban voltak résztvevők. Az EU VI. Keretprogramja keretében benyújtott pályázataik közül több elbírálása még folyik, de 2005 elején már ismert, hogy a 2004-ben értékelt pályázatok kapcsán újabb 18 nyertes projektben, illetve hálózatban már biztos részt vesznek.

A SZTAKI - elsőként a régióból - 11 éve tagja az *ERCIM-nek (European Research Consortium for Informatics and Mathematics)*, az információtechnológia területén történő európai tudományos együttműködés elősegítésére alakult szervezetnek. Az ERCIM vette át a világméretű *WWW konzorcium európai irodáját*, a SZTAKI pedig a *WWW konzorcium magyar irodájának* ad otthont.

Összhangban az európai kutatási térség kialakítását célzó törekvésekkel, folytatják *nemzetközi virtuális intézetek és laboratóriumok* kialakítását. A Fraunhofer Társasághoz tartozó stuttgarti székhelyű Gyártástechnológia és Automatizálási Intézettel (IPA) budapesti székhellyel 2002-ben létrehozott Termelés és Üzleti Menedzsment Virtuális Intézetet után 2004-ben több nemzetközi virtuális laboratóriumot alapítottak, többek között a CIM Kutató Központtal (Lugano), az Ipari Technológia-Transfer Központtal (Seibersdorf), a Szófiai Műegyetemmel, az INSA Rennes Egyetemmel és Bécsi Műszaki Egyetemmel. Az intézet egyik kulcsszereplője az EU VI. Keretprogramba tartozó, a gyártás területén talán legjelentősebb kiválósági hálózatnak (*Virtual Research Laboratory on Knowledge Community in Production*) is. A SZTAKI volt a kezdeményezője a *Central European Grid Consortium* létrehozásának is, melynek célja a Közép-Európai országok Grid kutatásainak és infrastruktúra fejlesztéseinek összehangolása.

Az intézet munkatársai eredményesen működnek a témakör legjelentősebb nemzetközi tudományos szervezetek (CIRP, IEEE, IFAC, IFIP, stb.) vezetésében és munkabizottságaiban. Számos munkatársuk tagja vezető nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának.

Az intézet több kutatóját kérték fel közreműködésre a VII. Keretprogram fő irányainak kialakítása, valamint részvételre az EU és az USA (National Science Foundation) közti együttműködési témák kidolgozása során. Az MTA kétoldalú egyezményes és a TÉT kapcsolatok keretében megvalósult utazások különösen az alapkutatói fázisban igen hasznosak, a kutatók élnek is a lehetőséggel.

Európán kívüli kutatásfinanszírozási forrásaik közül kiemelésre méltóak az Office of Naval Research, USA; National Science Foundation, USA; US Army Research Office (ARO) szervezetek, melyekkel a CNN-kutatások terén állnak kapcsolatban.

Részvétel a hazai felsőoktatásban

Az *egyetemi graduális is posztgraduális oktatást* az intézet továbbra is a kutatási tevékenység fontos velejárójaként és a jövőépítés elengedhetetlen feltételeként kezeli. Rendszeres oktatási tevékenységet folytatnak a következő hazai felsőoktatási intézményekben: BME, ELTE, BKÁE, VE, PTE, ME, PPKE. Az együttműködési formák sokrétűek: kutatók teljes, vagy egészállású egyetemi foglalkoztatása, kihelyezett tanszékek, egyetemi tanszékek vezetése, közreműködés informatikai karok létrehozásában.

A *Magyar Info-Bionikai Központot* az elektronika-informatika és a biológiai tudományok területén (különös tekintettel a neurobiológiára) a Magyar Tudományos Akadémia 6 kutatóhelye és 6 egyetemi kutatólaboratórium hozta létre. Szintén a SZTAKI kezdeményezésével jött létre a *Magyar Grid Kompetencia Központ* (MGKK) a BME, ELTE és NIIFI részvételével, később csatlakozott az RMKI is.

Sokéves együttműködés újabb jeleként a 2004-ben első ízben kiírt *Regionális Egyetemi Tudásközpontok* pályázatban a SZTAKI részt vesz a BME által vezetett *Elektronikus jármű és járműirányítási tudásközpont* projektben. Szintén kiemelendő az Intézet szerepe a 2004-ben indult *Mobil kommunikációs kutatás-fejlesztési központ és innovációs centrum* című, a BME-vezetésű NKTH projektben.

Átlagosan mintegy 30 PhD hallgató végzi kutatómunkáját az intézetben, vezető kutatók témavezetése mellett. A hazai doktori iskolákban munkatársaik 25 esetben szerepelnek külső, és 5 ízben belső alapító tagként.

A tradicionális oktatási módszerek mellett léptek mind a *multimédia eszközök* felhasználása, mind a *távoktatás* felé.

Az intézet által szervezett tudományos rendezvények

CIRP-ISMS2004 - The 37th CIRP International Seminar on Manufacturing Systems	május 19-21.	90 fő
5 th International Workshop on Emergent Synthesis, IWES'04	május 24-25.	30 fő
IEEE CNNA 2004 - The 8th IEEE International Biannual Workshop on Cellular Neural Networks and their Applications	június 22-24.	120 fő
BUDAPEST 2004: IJCNN 2004 - International Joint Conference on Neural Networks & FUZZ IEEE 2004 - IEEE International Conference on Fuzzy Systems	június 25-28.	900 fő
Grammar Systems Week	július 5-9	30 fő
DAPSYS 2004, 5th Austrian-Hungarian Workshop on Distributed and Parallel Systems	szeptember 19-22.	128 fő
ADBIS'04 - Eighth East-European Conference on Advances in Databases and Information Systems	szeptember 22-25.	77 fő
ERNSI Workshop System Identification 2004	október 4-6.	75 fő

A fentiek közül kiemelkednek:

- A neurális hálózatokkal és a fuzzy rendszerekkel foglalkozó IJCNN és FUZZ-IEEE konferenciák, az IEEE legjelentősebb rendezvényei közé tartoznak. Az intézet együtt rendezte a két konferenciát Budapesten közel 900 résztvevővel. A konferencia mind tudományos színvonalát, mind szervezésének minőségét tekintve kiemelkedett a szervezet rendezvényei sorából és komoly tekintélyt szerzett nemcsak az MTA SZTAKI-nak, hanem az egész magyar tudományos életnek.

- A CIRP (International Institution for Production Engineering Research) szeminárium keretében került megrendezésre a *Manufuture* Kerekasztal, mely annak az EU által kezdeményezett rendezvénysorozatnak volt fontos állomása, melynek célja az európai GDP közel 30%-át kitevő gyártás jövőjének elősegítése. Ide tartozik, hogy várhatóan Magyarország rendezheti a CIRP 2011-es Közgyűlését.
- Az Európai Unióhoz való csatlakozás eredményeképpen a hazai automatizálási kutatások még aktívabban kapcsolódnak az EU-n belüli többoldalú együttműködésekhez. Ennek fontos állomása volt az ERNSI Workshop, amelyen az Unió legnevesebb tudósai vettek részt Dobogókőn. Előzetes tárgyalásokat folytattunk arról, hogy a szakma legnagyobb európai rendezvénye, az Európai Automatizálási Konferencia 2009-ben Budapesten kerüljön megtartásra.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A hazai projektjeik közül kiemelendő, hogy 10 korábban elnyert NKFP projektben végeztek K+F tevékenységet:

- Érzékelő számítógépek és távjelenlét
- Haszonjármű forgalom irányítása fedélzeti és távinformáció felhasználásával
- Tudásintenzív információs technológia nagy ipari rendszerek biztonságos és optimális működtetéséhez
- Digitális mozgókép helyreállító rendszer filmarchívumok számára
- Digitális vállalatok, termelési hálózatok
- Informatikai biztonsági technológia és adatbiztosítás
- Az információs társadalom igényorientált eszközei és rendszerei
- Térdiszkrét számítógépes megjelenítésén alapuló stereotaxisos és navigációs műtéti eljárások
- Globális konferenciahálózat
- Adatrosta – intelligens adatbányászati eszköztár

A projektek közül jó néhány – sikerrel – lezárult 2004-ben. A legújabb kiírás során a következő projekt-javaslatok nyertek el támogatást (egyenként kitérve jelentőségükre):

Szemantikai integrációs technológia alkalmazása GRID-alapú, modell-vezérelt architektúrákban

A projekt fő célja egy olyan – fogalmi szintre is kiterjedő, elosztott, grid-architektúrában működő, virtuális adatbázis kezelésén alapuló – új információintegrációs technológia kialakítása és kísérleti alkalmazása, amely lehetővé teszi a legkülönbébb típusú információk egységes és együttes kezelését és ezzel az informatikai alkalmazások egymás közötti és használóikkal folytatott kommunikációjának szemantikai hibáktól mentes, hatékony megvalósulását. A kifejlesztendő technológia széles körű alkalmazhatóságát a projekt két jelentősen eltérő alkalmazói körben kívánja demonstrálni: egyrészt kulturális örökségünk digitális archívumai körüli informatikai szolgáltatások javításával (a Nemzeti Digitális Adattárhoz kapcsolódóan), másrészt középvállalkozások bizonyos vállalati adatintegrációs és elektronikus üzletviteli, kereskedelmi problémáinak megoldásával (az ún. vállalati információ integráció piaci irányvonalhoz kapcsolódóan).

Önszervező tanulási módszereken alapuló természetes nyelvi modellek és hasznosításuk irodai környezetben

A szöveges e-dokumentumok elérhetővé tétele kritikus eleme a vállalatok hatékony működtetésének. A projekt célja, hogy megcélazza a világpiacon jelentkező ilyen irányú igények kielégítését egy, a ma szokásostól radikálisan eltérő új megközelítéssel, az extrém méretű korpuszokon történő önszervező tanulással felépített nyelvi rendszerek alkalmazásával. Szemben a korábbi megközelítésekkel, az önszervező módon tanult nyelvmodellek jóval kevesebb ad-hoc elemet tartalmaznak, s így általuk a korábbiaknál jobb eredmények érhetőek el. A projekt keretén belül a számítógépes nyelvészek, matematikusok, kognitív tudósok, fizikusok, adatbányászok, gépi tanulás szakemberek dolgoznak együtt – a multidiszciplináris megközelítéstől is várják a projekt újszerű, áttörést hozó eredményeit. Szintén cél a tanult nyelvmodellekre szervesen ráépülő ipari igényeket kiszolgáló nyelvtechnológiák, illetve az ezekre épülő, tipikus vállalati problémákat megcélzó alkalmazás prototípusok kifejlesztése is.

A szaruhártya új, nagy pontosságú, a klinikai szemészeti gyakorlatban alkalmazható topográfiai vizsgálati módszereinek kidolgozása

A pályázat célja egy új működési elvű, nagy pontosságú szaruhártya-topográf optikai, mérés-technikai és szoftver-rendszerének kifejlesztése, továbbá a kifejlesztett kísérleti készülék kipróbálása és értékelése a szemészeti diagnosztikában. A szaruhártya-topográfot a szemészeti praxisban gyakran végzett videokeratószkópiái – a szem szaruhártya alakját és optikai törőerejét meghatározó és térképszerűen megjelenítő – vizsgálatokhoz használják. E vizsgálatok nagy diagnosztikai jelentőségűek. A projekt során kifejlesztésre kerülő kísérleti elrendezés az ismert szaruhártya-topográfok hibáit és hiányosságait kívánja kiküszöbölni. Ezt támogatják egyfelől a szaruhártya-topográfba beépülő, illetve a fejlesztés során használt korszerű optikai, elektronikai és számítástechnikai eszközök, másfelől a projekt során kidolgozásra és alkalmazásra kerülő, matematikailag, optikailag, mérés-technikailag, valamint a képi látás vonatkozásában is egyaránt megalapozott mérési, kiértékelési módszerek.

Valósídejű, kooperatív termelési struktúrák informatikai támogatása

A vállalatok kooperációra, gyors válaszadásra és a változások és zavarok kezelésére szolgáló képessége a hatékonyság és a túlélés létkérdésként jelentkezik, mégpedig a vállalati méretekől függetlenül. A projekt célja olyan módszerek kutatása és felhasználása, melyek alkalmasak a változó, bizonytalansággal terhelt környezetben működő, összetett műszaki és gazdasági rendszerek valósídejű kezelésére, különös tekintettel az informatika, az operációkutatás és a tudásalapú módszerek legújabb irányzataira, egyensúlyt teremtve az optimálás, autonómia és kooperáció terén. Elsősorban az egyedi igényekhez igazodó tömegtermelésre koncentrálva, a megcélzott főbb területek a következők:

- erőforrás-menedzsment és ütemezés,
- valósídejű termelésirányítás változások és zavarok kezelésére,
- elosztott, kooperatív termelési és logisztikai rendszerek integrálása.

Minden területen új, nemzetközileg jelentős fórumokon publikált alap kutatási eredményeken alapuló, alkalmazott kutatással és kísérleti fejlesztéssel kívánnak az iparban - nagyvállalatokban és a velük együttműködő kis- és középvállalatokban egyaránt - használható prototípus rendszereket kifejleszteni. A gazdaságosság érdekében a megoldások szolgáltatásként (e-service) nyújtását is célul tűzik ki.

Autonóm légi felderítés és navigáció

A projekt fő kutatómérnöki célkitűzése egy olyan kompakt, könnyű és alacsony fogyasztású látórendszer létrehozása, amely a pilóta nélküli repülő járművek önálló vizuális felismerő és navigációs egysége lehet. A rendszernek érzékelnie és földi támogatás nélkül értelmeznie kell a vizuális információt hosszú távú navigációs döntések autonóm kialakításához. Kieépítésében mérnöki megfontolásokat ötvöz biológiai megfigyelésekkel, hogy a célorientált tervezés során az architektúra és funkció lehető legszorosabb kapcsolata alakuljon ki. A tervezés különlegessége, hogy külső, infra és csillagfény erősítésű szenzorok csatlakoztatása is lehetséges, amelyek nehéz látási körülmények között (pl. köd, por és szürkület) is lehetővé teszik a vizuális információ kinyerést és tájékozódást. A látórendszer sikeres működése légi járművek könnyű modelljein kerül bemutatásra, jellegzetes terepformák és felszíni morfológiák, tereptárgyak, mozgó objektumok, illetve megváltozott környezeti viszonyok felismerésének demonstrálásával. A polgári felhasználásban elsősorban árvíz- és tűzvédelemben, növénytakaró differenciáltságának felderítésében, nagy területek biztonsági megfigyelésében, valamint közúti forgalom monitorozásában lehet jelentősége, hisz mindezen feladatok megoldását a jelenleg rendelkezésre álló technológiák - műszakilag megbízható módon, alacsony költségek mellett - még nem teszik lehetővé.

Igen fontosnak tartják, hogy a 2004-ben első ízben kiírt *Regionális Egyetemi Tudásközpontok* pályázatban a SZTAKI részt vesz a BME által vezetett *Elektronikus jármű és járműirányítási tudásközpont* projektben. A projekt célja, hogy a Magyarországon az elektronikusan irányított jármű és járműrendszerek területén az elmúlt közel 20 év alatt akadémiai és egyetemi környezetben felhalmozott tudást és a jelen pillanatban már rendelkezésre álló ipari háttérrel - amely a gyártáson túl kutatás-fejlesztéssel is rendelkezik - összekapcsolja és az így létrejött tudásbázist rendszerezve és továbbfejlesztve az iparág más résztvevői, elsősorban a hazai beszállítók rendelkezésére bocsátva kutatás-fejlesztési szolgáltatás formájában. Az együttműködés alatt létrejött *Tudásközpont* a teljes termékfejlesztési folyamat (kutatás, előfejlesztés, szériafejlesztés, vizsgálat, jóváhagyás és széria bevezetés) lefedéséhez szükséges elméleti háttérrel, metodikát, üzleti folyamatokat és eszközparkot kialakítva kívánja a fenti tevékenységet az egyetem bázisán működve ellátni. Bár a tudásbázis kialakítása alatt alapvetően – a rendelkezésre álló ipari háttér miatt – a közúti járműveket vizsgálja, a továbbiakban az itt megszerzett tudást felhasználva tevékenységét más területekre is ki fogja terjeszteni.

Szintén az intézet és a BME közötti jó együttműködést jelzi, hogy az intézet szerepel a 2004-ben elnyert *Mobil kommunikációs kutatás-fejlesztési központ és innovációs centrum* című NKTH kezdeményezésben. Ezáltal fontos elemmel bővül a SZTAKI tematikai portfóliója.

A fenti felsorolásból is kiderül, hogy az informatika és más tudományágak (anyag-, élet- és társadalomtudomány, matematika, mesterséges intelligencia, rendszer- és irányítástechnika, automatizálás, operációkutatás) és felhasználási területek (érezkelő számítógépek, járműipar, közlekedés, gyártása automatizálás, gyártásszervezés, kulturális örökség, egészségügy, információs társadalom, adatbiztonság, gyógyászat) olyan interdiszciplináris kutatására, fejlesztésére koncentrálnak, melyek hosszabb távon alapozhatják meg az intézet jövőjét.

Kapcsolataik ezúton is erősödnek olyan kiemelkedő szerepet betöltő nagyvállalatokkal, mint a GE, MATÁV, MOL, Paksi Atomerőmű, Knorr Bremse, ugyanakkor a kisvállalati résztvevők biztosítékok jelentenek arra, hogy eredményeik a lehető legszélesebb körben terjedjenek el.

Hasonlóan nagyjelentőségű témákban nyertek el 2004-ben külföldi projekteket, közülük 18 az EU 6. Keretprogramjába tartozik. A nemzetközi pályázatokon elnyert projektet listáját külön táblázat tartalmazza.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Hangos KM, Bokor J, Szederkényi G: Analysis and control of nonlinear process systems, London, Springer, 2004. 308 p.
2. APT KR, Fages F, Rossi F, Szeredi P, Váncza J (eds.): Recent advances in constraints. Joint ERCIM/CoLogNET international workshop. Budapest, 2003, Berlin, Springer, 2004. 284 p. (Lecture notes in computer science 3010.)
3. Csuhaj-Varjú E, Vaszil Gy. (eds.): Proceedings of grammar systems week 2004. Budapest, 2004, Budapest, MTA SZTAKI, 2004. 327 p.
4. Kranzmüller D, Kacsuk P, Dongarra J (eds.): Recent advances in parallel virtual machine and message passing interface. 11th European PVM/MPI user's group meeting. Proceedings., Berlin, Springer, 2004. 453 p. (Lecture notes in computer science 3241.)
5. Monostori L (ed.): Proceedings of the 37th CIRP international seminar on manufacturing systems. Digital enterprises, production networks. Budapest, 2004, Budapest, MTA SZTAKI, 2004. 464 p.
6. Roska T, Gili M, SHI B, Zarándy Á (eds.): CNNA 2004. Proceedings of the 8th IEEE international workshop on cellular neural networks and their applications. Budapest, 2004, Budapest, IEEE, 2004. 496 p.
7. Ueda K, Monostori L, Márkus A (eds.): IWES'04. Proc. of the 5th international workshop on emergent synthesis, Budapest, 2004, Budapest, MTA SZTAKI, 2004. 147 p.
8. Gál V, Hámori J, Roska T, Bálya D, Borostyánkői Zs, Brendel M, Lotz K, Négyessy L, Orzó L, Petrás I, Rekeczky Cs, Takács J, Venetiáner P, Vidnyánszky Z, Zarándy Á: Receptive field atlas and related CNN models, International Journal of Bifurcation and Chaos, 14 (2) : 551-584. (2004)
9. Rekeczky Cs, Szatmári I, Bálya D, Tímár G, Zarándy Á: Cellular multiadaptive analogic achitecture: a computational framework for UAV Applications, IEEE Transactions on Circuits and Systems - I: Regular Papers, 51 (5) : 864-884. (2004)
10. Török L, Roska T: Stability of multi-layer cellular neural/non-linear networks. International Journal of Bifurcation and Chaos, 14 (10) : 3567-3586. (2004)
11. Vilarino DL, Rekeczky Cs: Implementation of a pixel-level snake algorithm on a CNN-UM based chip set architecture, IEEE Transactions on Circuits and Systems - I: Regular Papers, 51 (5) : 885-891. (2004)
12. Wagner R, Zarándy Á, Roska T: Adaptive perception with locally adaptable sensor array, IEEE Transactions on Circuits and Systems - I: Regular Papers, 51 (5) : 1014-1023. (2004)
13. Csuhaj-Varjú E, Salomaa A: The power of networks of Watson-Crick DOL systems, In: Aspects of molecular computing. Essays dedicated to Tom Head, on the occasion of his

- 70th birthday, (Eds.: N. Jonoska, Gh. Paun, G. Rozenberg.), Berlin, Springer, 2004. pp. 106-118, (Lecture notes in computer science series 2950.)
14. Dassow J, Vaszil Gy: Multiset splicing systems, *BioSystems*. 74 : 1-7. (2004)
 15. Kis T: On the complexity of the car sequencing problem, *Operations Research Letters*, 32: 331-335. (2004)
 16. Váncza J, Kis T, Kovács A: Aggregation - the key to integrating production planning and scheduling, *CIRP Annals*, 53 (1): 377-380. (2004)
 17. Monostori L, Csáji B, Kádár B: Adaptation and learning in distributed production control, *CIRP Annals*, 53 (1): 349-352. (2004)
 18. Müller M, Erdős G, Xirouchakis P: High accuracy spline interpolation for 5-axis machining, *Computer-Aided Design*, 36: 1379-1393. (2004)
 19. Mezgár I: Novel networking technologies for collaborative networked organizations, In: *Virtual enterprises and collaborative networks. IFIP 18th world computer congress. Toulouse, 2004.* (Ed.: L. M. Camarinha-Matos.), Boston, Kluwer, 2004. pp. 397-406.
 20. Benkő P, Várady T: Segmentation methods for smooth point regions of conventional engineering objects, *Computer-Aided Design*, 36 : 511-523. (2004)
 21. Jankó Zs, Chetverikov D: Registration of an uncalibrated image pair to a 3D surface model, In: *ICPR 2004, 17th intern. conference on pattern recognition. Cambridge, 2004.* Vol. 2. (Eds. J. Kittler, M. Petrou, M. Nixon.), Los Alamitos, IEEE, 2004. pp. 208-211.
 22. Renner G, Weiss V: Exact and approximate computation of B-spline curves on surfaces, *Computer-Aided Design*, 36 (4): 351-362. (2004)
 23. Györfi L: Large deviations of Hellinger distance on partitions, In: *Mathematics and computer science III, Algorithms, trees, combinatorics and probabilities.* (Eds.: M. Drmota et al.), Basel, Birkhäuser, 2004. pp. 531-537, (Trends in mathematics.)
 24. György A, Linder T, Lugosi G: Efficient adaptive algorithms and minimax bounds for zero-delay lossy source coding, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 52 : 2337-2347. (2004).
 25. Gerencsér L, Mátyás Z: A system theoretic approach to behavioral finance, In: *43rd IEEE conference on decision and control, Paradise Island, Bahamas, 2004, Piscataway, IEEE, 2004.* pp. 335-339.
 26. Gyárfás A, Jensen T, Stiebitz M: On graphs with strongly independent color-classes, *Journal of Graph Theory*, 46 (1): 1-14. (2004)
 27. Gass SI, Rapcsák T: Singular value decomposition in AHP, *European Journal of Operational Research*, 154 (3): 573-584. (2004)
 28. Rapcsák T: Some optimization problems in multivariate statistics, *Journal of Global Optimization*, 28: 217-228. (2004)
 29. Bányász Cs, Keviczky L: Robust stability limit of time-delay systems, In: *Proceedings of the 2004 American Control Conference, Boston, 2004, Boston, AACC, 2004.* pp. 5428-5432.

30. Bokor J, Balas G: Detection filter design for LPV systems - a geometric approach, *Automatica*, 40: 511-518. (2004)
31. Gáspár P, Szászi I, Bokor J: The design of a combined control structure to prevent the rollover of heavy vehicles, *European Journal of Control*, 10: 148-162. (2004)
32. Hangos KM, Szederkényi G, Tuza Zs: The effect of model simplification assumptions on the differential index of lumped process models, *Computers and Chemical Engineering*, 28: 129-137. (2004)
33. Stikkel G, Bokor J, Szabó Z: Necessary and sufficient condition for the controllability of switching linear hybrid systems, *Automatica*, 40 : 1093-1097. (2004)
34. Szederkényi G, Hangos KM: Global stability and quadratic Hamiltonian structure in Lotka-Volterra and quasi-polynomial systems, *Physics Letters, A* 324 (5-6): 437-445. (2004)
35. Bacsó G, Gravier S, Gyárfás A, Preissmann M, Sebő A: Coloring the maximal cliques of graphs, *SIAM Journal on Discrete Mathematics*, 17 (3): 361-376. (2004)
36. Mansini R, Spornaza MG, Tuza Zs: Scheduling groups of tasks with precedence constraints on three dedicated processors, *Discrete Applied Mathematics*, 134: 141-168. (2004)
37. Lovas R, Dózsa G, Kacsuk P, Podhorszki N, Drótos D: Workflow support for complex grid applications. Integrated and portal solutions, In: *Grid Computing. Second European AcrossGrids Conference, AxGrids 2004, Cyprus, 2004*, (Ed.: M. D. Dikaiakos.), Berlin, Springer, 2004. pp. 129-138. (Lecture notes in computer science 3165.)
38. Németh Cs, Dózsa G, Lovas R, Kacsuk P: The P-GRADE grid portal. In: *Computational science and its applications - ICCSA 2004, International conference. Proceedings. Assisi, 2004. Part II* (Eds.: A. Lagana et al.), Berlin, Springer, 2004. pp. 10-19. (Lecture notes in computer science 3044.)
39. Baranyi P, Kóczy LT, Gedeon TD: A generalized concept for fuzzy rule interpolation, *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*, 12 (6): 820-837. (2004)
40. Baranyi P: TP model transformation as a way to LMI-based controller design, *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 51 (2): 387-400. (2004)
41. Szepesvári Cs: Shortest path discovery problems: a framework, algorithms and experimental results, In: *AAAI-04/IAAI-04, 19th national conference on Artificial intelligence (AAAI-04). 16th innovative applications of artificial intelligence (IAAI-04). Proceedings. San Jose, 2004, Menlo Park, AAAI Pr., MIT Pr., 2004*. pp. 550-555.

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	316	Ebből kutató ² :	204
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			87
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			367
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			367
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	76	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	10
nemzetközi együttműködés keretében:	39	SCI által regisztrált folyóiratban:	86
összesített impakt faktor:	56,61	összes hivatkozás száma ⁴ :	1355
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1355
Megjelent könyv:	11	könyvfejezet:	12
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	3
		jegyzet:	23
		jegyzet:	2
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	-
Bejelentett találmányok száma:	3	Megadott szabadalmak száma:	3
<i>ebből</i> külföldön:		<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	234	poszterek száma ⁶ :	-
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			55
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	74	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	46
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			1295 MFt
Beruházási támogatás:	20 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	3
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			18
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			34 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			-
NKFP:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Egyéb:	-	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			33
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			421 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			54
EU forrásból:	52	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	447 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			11
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			80 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			167 MFt

SZILÁRDTESTFIZIKAI ÉS OPTIKAI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly-Thege M. út 29-33, 1525 Budapest, Pf. 49

Telefon: 392-2212, Fax: 392-2215

e-mail: szfki@szfki.hu, honlap: <http://www.szfki.hu/>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Alap kutatások végzése az elméleti és kísérleti szilárdtestfizika (kondenzált anyagok fizikája, nanoszerkezetek, vékonyrétegek és felületek fizikája), továbbá az elméleti és kísérleti optika (optikai kristályok fizikája, nemlineáris és kvantumoptika, lézerfizika) területén. *Alkalmazott kutatások* végzése (új anyagok előállítása és vizsgálata, új anyagvizsgáló módszerek fejlesztése, optikai kristályok és vékonyréteg eszközök előállítása és alkalmazása, valamint a lézerek fejlesztése és alkalmazása). Az alaptevékenységhez illeszkedő új *metodikák* fejlesztése. Graduális és posztgraduális *szakemberképzés*.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

*Erősen korrelált rendszerek**

Munkájuk jelentős része ez évben is a sűrűségmátrixot használó renormálási csoport (DMRG) módszer impulzustérbeli, illetve kvantumkémiai változatával kapcsolatos numerikus programcsomag fejlesztése volt. A kvantum-adatsűrítés módszerét kiterjesztették olyan véges méretű kvantum rendszerekre, ahol a Neumann entrópia nem a részrendszerek entrópiájának összege. Ezt az egydimenziós Hubbard modell entrópiájának vizsgálatára alkalmazták. A blokk-állapotok dinamikus szelektálásán alapuló módszert (DBSS) dolgoztak ki, majd ezt kiegészítették az aktív tér dinamikus kiterjesztésével (DEAS), s ezek révén lényegesen csökkentették a memóriaigényt és javították a konvergencián.

Résztevők: összesen 9 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 25 MFt költségvetési támogatás, 5 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

*Komplex rendszerek**

Véletlen kötésű antiferromágneses Heisenberg spinláncok alacsony energiás, alacsony hőmérsékletű tulajdonságait vizsgálták sűrűségmátrix renormálás módszerével a spin $S=1/2$, 1 és $3/2$ értékre. Ferromágneses rendszerek nemegyensúlyi kritikus relaxációját tanulmányozták felületek és inhomogenitások közelében. $S=1$ spinű spinor Bose gázok tulajdonságait külső mágneses tér jelenlétében tanulmányozták. S -spinű, Fermi statisztikát követő atomok alapállapotában megjelenő Cooper-párok tulajdonságait kutatták. Nem kölcsönható illetve csapdázott Bose gázok tulajdonságait szimulálták és tanulmányozták matematikai módszerekkel.

Résztevők: az SZFKI 4 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 13 MFt költségvetési támogatás, 7,2 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

* A KFKI Kondenzált Anyag Kutatóközpont (KFKI-CMRC) keretében végzett munka

*Elektronállapotok fémekben**

A korábban kifejlesztett egzakt muffin-tin pályák módszerét a koherens-potenciál közelítéssel kombinálva kiszámították a lapcentrál (fcc) szerkezetű nem mágneses átmeneti fémek felületi feszültségét. Az Uppsalai Egyetemmel való együttműködés keretében a $4d$ átmeneti fémek felületi relaxációját, felületi energiáját, valamint felületi feszültségét vizsgálták. A Korringa-Kohn-Rostoker módszer teljesen relativisztikus kiterjesztésével kiszámolták a réz felületre helyezett mágneses vas atomot tartalmazó kvantum-corrall spin-polarizált állapotait.

Megmutatták, hogy az URu_2Si_2 ötvözetben észlelt rejtett rend az octupólusú rend és az antiferromágneses rendeződés közötti versengés következtében lép fel. A javasolt modelljük nagyon jól egyezik a kísérleti eredményekkel.

Résztvevők: összesen 9 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 25 MFt költségvetési támogatás, 10,2 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

*Nem-egyensúlyi ötvözetek**

Két lényegesen különböző rendszerben, a negatív képződéshőjű (tehát az alkotók keveredésére törekvő) Fe-Al és a pozitív képződéshőjű (azaz természetes módon szétváló) Fe-Ag ötvözetek között vizsgálták nanoskálán granuláris ötvözetek képződését mechanikai őrlés és ultravákum párologtatással kialakított néhány atomi réteg vastagságú nem-folytonos multi-rétegek révén. Meghatározták a nanorendszerek mágneszettségének összetétel-, hőmérséklet- és külső mágneses tér függését szupravezető magnetométer segítségével. Az eredményeket összekapcsolták a mágneses rendet atomi skálán érzékelő mágneses hiperfinom tér Mössbauer-spektroszkópia segítségével (széles külső mágneses tér- és hőmérséklet-tartományban) történő jellemzésével. Ezek a vizsgálatok azt teszik lehetővé, hogy a gyakorlati alkalmazások szempontjából fontos néhány nanométeres tartományokban különféle mágneses állapotok legyenek kialakíthatóak, és olyan módszerek váljanak kidolgozhatóvá, amelyek mágneses tulajdonságaik jellemzésére alkalmasak. Megállapították, hogy az 1:1 sztöchiometriájú FeAl ötvözet, ami makroszkopikus méretben és rendezett állapotban nem-mágneses, mechanikai őrlés után merev mágneses habként viselkedik: a nanométeres skálájú szemcsék felületén néhány atomi réteg vastagságú, közel kétdimenziós mágneses viselkedést mutató vas-dús réteg alakul ki. Megkezdték a $FeAl_2$ összetételű ötvözet vizsgálatát, tömbi állapotban kompenzált ferrimágneses viselkedést tártak fel, amit neutrondiffrakciós vizsgálat is megerősített. A nemzetközi együttműködésben molekulásugaras epitaxiával előállított Fe-Ag rétegek mágneses és Mössbauer spektroszkópiai jellemzése révén kapcsolatokat találtak a mágneses adattárolásban alapvető szerepet játszó mágneses ellenállás változást meghatározó paraméterekkel.

Résztvevők: az SZFKI 6 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 38 MFt költségvetési támogatás, 6,3 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

*Röntgen diffrakció**

A csoport négy területen ért el kiemelkedő eredményeket:

- Kidolgozták szén nanocső rétegek különböző szubsztrátumokra és szabadon álló formában való előállításának technikáját. Megvizsgálták, hogy az így előállított anyagok optikai spektruma hogyan változik ionos dopolás és kémiai funkcionálás hatására.
- Modellszámolásokat végeztek kis részecskék intenzív röntgen impulzusban való viselkedésének leírására. Ennek eredményeképpen megállapították, hogy a következő években felépítendő szabad elektron lézerek segítségével való egyrészecske atomi szerkezet-meghatározás csak a tervezetnél rövidebb impulzussal, vagy a mérendő jel gyors kapuzásával lehetséges.
- Egy új iteratív algoritmust dolgoztak ki kristályok szerkezetének ab initio meghatározására. A módszer különlegessége, hogy sem a kémiai összetétel, sem pedig előzetes szimmetria információ nem szükséges a szerkezet meghatározásához.
- Továbbfejlesztették a nukleációra és kristálynövekedésre vonatkozó fázismező modelljüket úgy, hogy az komplex polikristályos növekedés leírására is alkalmas legyen. Kiterjedt modellszámolások segítségével azonosították a különböző polikristályos növekedési formák kialakulásának mechanizmusait.

A felsorolt eredmények közül eddig még egyik sem hozott közvetlen gazdasági hasznot, de a jövőben mindegyik nagy haszonnal kecsegtet.

Résztvevők: összesen 14 kutató, ebből 13 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 89 MFt költségvetési támogatás, 27,6 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

Elektron kristályok

A magas szupravezető átalakulási hőmérsékletű alkáli-fulleridok (alkáli fémmel adalékolt C_{60} vegyületek) fizikájában és kémiájában fontos szerepet játszik a C_{60} labdák orientációja a kristályos fázisban. A gömbhöz közel álló alakú molekulák magas hőmérsékleten ugyanis könnyen elfordulnak, ún. *plasztikus kristályként* viselkednek. Ismeretes, hogy a labdák egymáshoz képesti irányultságának fontos szerepe van például a molekulák polimerizációjában vagy az elektronpályák irányfüggő átfedése következtében az elektromos tulajdonságokban. A kutatómunka során a Na_2CsC_{60} anyagban mágneses magrezonancia (NMR) segítségével vizsgálták a C_{60} molekulák orientációs dinamikáját. A ^{23}Na mag számos NMR paraméterének (spektrum, spin-rács és spin-spin relaxációs idő, spin-echo kettősrezonancia) mérésével arra a következtetésre jutottak, hogy alacsony hőmérsékleten a molekulák két különböző orientációt vesznek fel. A hőmérséklet növelésével megjelenik a dinamikus reorientáció a kétféle beállítás között; ezért széles hőmérséklettartományban jellemezték a reorientációs dinamikát.

Résztvevők: összesen 8 kutató, ebből 7 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 28 MFt költségvetési támogatás, 4,9 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

Fémfizika

A hidrogéntároló anyagok modelljeként szolgáló, nagy tisztaságú PdH_y és $(Pd_{1-x}Ag_x)H_y$ ötvözetek 1H -NMR szabad precessziós és spin-echo spektrumainak és relaxációs ideinek a vizsgálata megmutatta, hogy a rendszerekben a hidrogén nem tisztán dipólus-csatolt, nem azonos magspinekből álló rendszerként viselkedik; továbbá az $y < 0,06$ koncentrációjú ötvözetek α -fázisának leírására használt rács-gáz modell alkalmatlannak bizonyult. Ez utóbbi minták 1H -

NMR spektrumaiban megjelenő jelentős dipólus-dipólus járulékok hidrogén-klaszterek létezésére utal. – Palládium fém elektrolitikus hidrogénezését ellenállásmérésekkel nyomon követve azt találták, hogy a hidrogénbevitelnél másfélszer, a hidrogéneltávolításnál mintegy kétszer annyi hidrogén vesz részt a folyamatban, mint ami a Faraday törvény alapján számítható, de még nem sikerült azonosítani az ilyen, hidrogéntöbbletet előidéző folyamatokat.

Elektrokémiai impulzusos előállítási technikával készített mágneses/nem-mágneses multirétegek esetében az óriás mágneses ellenállás (GMR) jelenséget erősen leronthatja a kevésbé nemes fémből (pl. Co) álló mágneses rétegnek a nemesebb (pl. Cu) fémből álló nem-mágneses réteg leválasztása alatt bekövetkező oldódása. Megmutatták, hogy az ezen oldódás elkerüléséhez szükséges Cu-leválasztási potenciál pontos megállapítása csak a Cu-leválasztási impulzusok alatt mért áramtranziensek mérésével állapítható meg. Az így módon meghatározott körülmények között leválasztott Co-Cu/Cu multirétegeknél teljesen ki tudták küszöbölni a mágneses rétegek oldódását. Ezzel a módszerrel készített multirétegeken végzett vizsgálatok feltárták, hogy a kétféle alkotó réteg nem egyformán nukleálódik egymáson, ami lényegesen elősegítette a GMR viselkedésekben megfigyelhető jelentős eltérések jobb megértését. A nagy mágneses terekig ($H > 10$ kOe) nem telítődő GMR-t mutató multirétegekre megmutatták, hogy ez a jelenség annak feltételezésével értelmezhető, hogy a mágneses rétegek egy része nem ferromágneses, hanem szuperparamágneses viselkedést mutat, amit mágneses mérések is igazoltak.

Az $^1\text{H-NMR}$ módszert eredményesen használták speciális fehérjék kutatásában is. Fehérjék fiziológiás oldatának $^1\text{H-NMR}$ vizsgálata azt bizonyítja, hogy a széles-jelű NMR módszerek lehetővé teszik a rendezetlen fehérjék jellemzését; megmutatva a globuláris fehérjékénél jelentősen nagyobb hidrát-burkukat, a spin-spin relaxációs sebességek nagy különbségét, továbbá a hidrát-burok legerősebben kötött részének dinamikájában kapott aktiválási energia 50 %-os többletét. A korrelációs időállandók is jelentősen, nagyságrendekkel különböznek a kétféle fehérjetípusnál.

Résztvevők: az SZFKI 8 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 32 MFt költségvetési támogatás, 7,9 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

Lágymágneses nanokristályos anyagok.

Új nanokristályos ötvözeteket fejlesztettek ki foszfor ($\text{Fe}_{81}\text{P}_{13}\text{Si}_2\text{Nb}_3\text{Cu}_1$) és foszfor-bór ($\text{Fe}_{84,5}\text{Nb}_5\text{B}_{8,5}\text{P}_2$) alapú amorf előötvözetekre alapozva. Ez utóbbi összetétel kobalttal ötvözött változata szabadalmaztatás alatt van, mivel egyszerre kielégíti a magas hőmérséklet (300°C) és magas frekvencia (2 MHz) iránt támasztott igényeket, ugyanakkor a telítési mágneszettsége is a lehető legmagasabb az ismert nanokristályos ötvözetek között.

Nanoszerkezetű vas rétegeket, valamint vas/vasoxid multirétegeket állítottak elő impulzus üzemmódban működő elektrolitikus leválasztással, ami sajátos lapos hiszterézis hurokkal rendelkezik, így igen előnyös a nagyfrekvenciájú alkalmazások szempontjából. Ennek az önmagától lapos (mindenféle mágneses vagy mechanikai feszültség alatti hőkezelés mellőzésével létrejövő) hiszterézis görbével jellemezhető vastagréteg ($5\text{-}10\ \mu\text{m}$) induktív elemnek a szabadalmi bejelentése előkészületben van.

A gyakorlati hasznosítás előkészítésére félüzemű mágneseres hőkezelő kemencét építettek, amiben egyszerre lehet hőkezelni több száz nanokristályos anyagból készült vasmagot. A maximális hőmérséklet 800 °C és a maximális tér 1400 Oe.

Résztvevők: összesen 12 kutató, ebből 11 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 47 MFt költségvetési támogatás, 8,2 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

*Folyadékkristályok**

- Kimutatták, hogy a folyadékkristály elektromos vezetőképesség anizotrópiájának előjelváltása megváltoztatja az elektrokonvekciós mintázatok jellegét és kialakulási mechanizmusát.
- A Swift-Hohenberg modelre épülő számítások és szimulációk segítségével értelmezték a homeotróp nematikusban közvetlen átmenettel kialakuló elektrokonvekciós (csík ill. kváziperiodikus rács) mintázatok morfológiáját.
- Kimérték az elektrokonvekció során fellépő fluktuációk teljesítmény spektrumát, mely a más nemegyensúlyi rendszerekben találtakhoz hasonlónak bizonyult.
- Kimutatták, hogy puha polimer felületeken a folyadékkristály rendezettségének iránya térrel megváltoztatható. A felületi deformáció relaxációs idejében a polimer üvegesedési hőmérséklete környezetében erős hőmérsékletfüggést találtak.
- Kubán vázat tartalmazó, egyenes ill. hajlott törzsű molekulákból álló új vegyületcsaládot állítottak elő, melynek egyes tagjai nematikus és/vagy szmektikus folyadékkristály fázissal rendelkeznek.

A fenti kutatások a jelenségek mélyebb megértését szolgálják, a felületi orientációval és új anyagok előállításával kapcsolatos eredmények potenciális alkalmazási lehetőséget hordozhatnak.

Résztvevők: az SZFKI 9 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 42 MFt költségvetési támogatás, 50,9 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

*Neutronspektroszkópia kondenzált anyagokban**

Kisszögű neutronszórás alkalmazásával különféle komplex folyadékokat tanulmányoztak. Többértékű alkoholok vizes oldataiban az alkoholmolekulák különböző típusú aggregátumokat alkotnak, a hidroxil csoportok számától és helyzetétől függően. A mérésekből kapott szerkezeti információk az oldatképződés termodinamikai leírásához használhatók. Ferrofolyadékok, azaz vízben vagy szerves oldószerben kolloid oldatot képző magnetit részecskék tulajdonságait vizsgálták. A részecskék mérete, valamint az őket körülvevő (felületaktív molekulákból álló) burok típusa és vastagsága befolyásolja a folyadék stabilitását és mágneses tér hatására adott válaszát. Ezen tulajdonságok meghatározása neutronszórás kísérletekkel hasznos információt ad alkalmazási lehetőségeik bővítésére valamint előállításuk technológiájának fejlesztésére.

Atomi felbontású neutron holográfia “belső forrás” változatát valósították meg fémhidrid mintákon. Elkészítették a PdH egykristály holográfikus képét, bizonyítva a hidrogéntartalmú anyagok holográfiás vizsgálatának lehetőségét. Az eljárás alkalmas a maradékdeformáció

(residual strain) jelenségének atomi szintű megfigyelésére. Az eredmények az NKTH projektjeiben hasznosíthatók.

Vizsgálták a reaktorteknikában használatos acélok mechanikai hatásra történő mikro-szerkezet-változását, valamint ezen anyagok hegesztési varratának mikro-szerkezetét. Ezek az eredmények segítséget nyújtanak a nukleáris létesítmények megbízhatóságának növeléséhez.

Berendezésfejlesztés: Új kollimátor rendszert telepítettek a kisszögű szórásvizsgáló berendezésre, amely a nyalábintenzitás számottevő (4-szeres) növekedését és a mérési idők megfelelő csökkenését eredményezte. – Új kompakt spin-echo kísérleti üzembehelyezésére került sor az egyik rugalmatlan neutronszerkezet berendezés opciójaként. Ez lehetővé teszi a rugalmatlan neutronszerkezet mérés felbontásának lényeges javítását, azaz a molekula és más kollektív rezgések (fonon, magnon,) részletesebb vizsgálatát.

Résztvevők: az SZFKI 13 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 60 MFt költségvetési támogatás, 64,5 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

*Neutronszerkezet**

Szkandiummal helyettesített bárium-hexaferritek kristály-, nukleáris- és mágneses szerkezetét vizsgálták neutrodiffrakciós módszerrel. Megállapították, hogy míg 300 K-en a mágneses szerkezet jól leírható az ún. Gorter-típusú rendezettség alapján, 10 K-en további mágneses reflexiók jelennek meg, ami a mágneses szimmetria megváltozására utal.

A CO és NO molekuláknak a folyadékfázisban megjelenő orientációs korrelációit tanulmányozták Reverse Monte Carlo (RMC) számítógépes modellezés segítségével. Megmutatták, hogy a folyékony CO-ban meglepően erős a szomszédos molekulák irányultsága közötti összefüggés.

CeO₂ és ZrO₂ tartalmú boroszilikát üvegek szerkezeti függvényeit mérték neutrodiffrakcióval, majd az RMC módszer segítségével közelítették a rendszerek parciális párkorrelációs függvényeit. Megállapították, hogy míg a CeO₂ adalék hatására kristallitok jelentek meg az amorf mátrixban, a ZrO₂ stabilizálta az üvegszerű szerkezetet. – Alacsony réztartalmú Fe-Cu ötvözetekben fellépő 'befagyasztott' belső feszültségeket vizsgáltak neutrodiffrakcióval a 'befagyasztás' hőmérsékletének függvényében. Megállapították, hogy a Cu-szemcsékben fellépő belső feszültség arányos a befagyasztás hőmérsékletével.

A boroszilikátos, illetve a Fe-Cu ötvözetes téma gyakorlati (ipari) szempontból is fontos, gazdasági hasznosságuk néhány éves távlatban elképzelhető.

Résztvevők: az SZFKI 9 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 45 MFt költségvetési támogatás, 20,4 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

*Lézerfény és szilárd anyag – főként nemlineáris – kölcsönhatásai**

Kísérletek: A legújabb, csupán néhány optikai rezgést (hullámot) tartalmazó, femtoszekundum időtartamú (10^{-15} sec) "szuperintenzív" lézerimpulzusok időbeli burkolójának a rezgésekhez képest kialakuló elhelyezkedése ("abszolút fázisa") döntő módon befolyásolja az ezen lézerimpulzusokkal kelthető fizikai (általában nemlineáris) jelenségek létrejöttét. Arany felületre irányítva ilyen impulzusokat – az intézetben korábban felfedeztethez hasonlóan –

sokfotonos elektron emissziót állítottak elő és elméletileg, valamint kísérletileg feltárták az említett lézerimpulzusok fázisának hatását az arany elektronjainak ultragyors dinamikájára. Saját felismerésük alapján az említett lézerimpulzusok segítségével a világ több kutatóhelyén előállították az eddig lehetséges legrövidebb, ún. "attoszekundumos" (10^{-18} sec időtartamú) fényimpulzusokat, melyekkel új fizikai, anyagtudományi, biológiai, stb. vizsgálatokat végeznek.

Elmélet: Bebizonyították, hogy vékony fémrétegen szóródó néhány ciklusos femtoszekundumos fényimpulzusok spektruma jelentősen függ az impulzusok abszolút fázisától. Megmutatták, hogy plazmarétegen áthaladó lézerimpulzusok kísérletileg tapasztalt intenzitásfüggő anomális transzmissziója elméletileg értelmezhető a frusztrált totálreflexióval.

Résztvevők: az SZFKI 2 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 11 MFt költségvetési támogatás.

Gázlézerek és gázkisülések

Nagyfeszültségű üreges katódú kisülésben az eddig ismert legrövidebb hullámhosszú folytonos Ag-II 224 nm lézerátmeneten gyakorlati célokra alkalmas lézert építettek, melyet a Magyar Regula 2004 műszerkiállításon mutattak be.

Alacsony nyomású nemesgáz kisülésekben kísérletileg megállapították az elektromos potenciál térbeli eloszlását (emissziós-szonda technikával), valamint elméletileg számítógépes hibrid modellezés segítségével. Üreges katódú argon kisülés begyűjtési karakterisztikáját szintén kísérletileg és szimulációs módszerekkel tanulmányozták. Erősen csatolt plazmák molekuladinamikai szimulációjával 2 és 3 dimenziós Yukawa rendszerek termodinamikai, szerkezeti és diszperziós tulajdonságait határozták meg.

Elektrolitkatódos, atmoszférikus nyomású ködfénykisülésnél (ELCAD) a katódporlasztás elemfüggését vizsgálták: zárt ELCAD cellát használtak egy induktívan csatolt plazma optikai emissziós forrás (ICP OES) porlasztó egységként. A kapott kísérleti eredményeket értelmezték.

Vákuumszerre illesztett multispektrális képalkotó ellipszométert fejlesztettek ki az MTA MFA-val közösen, mely valós időben képes a minták előállítás közbeni folyamatos monitorozására.

Résztvevők: az SZFKI 11 munkatársa

Anyagi ráfordítás: 66 MFt költségvetési támogatás, 7,4 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

Fémoptika

A Max-Planck Intézet garching-müncheni kvantumoptikai részlegével együttműködésben közeli tér pásztázó alagútmikroszkóppal vizsgálták különböző vékonyréteg rendszerekben keltett plazmonok fluktuációját. Megállapították, hogy a közvetlen plazmon jel keskeny Gauss- vagy Poisson-eloszlást, míg a plazmon rezgés termikus jele Boltzmann-eloszlást mutat. A keskeny Poisson-eloszlás arra utal, hogy a keltett plazmonok sugárzásának nem klasszikus sajátságai lehetnek.

Résztvevők: összesen 3 kutató, ebből 2 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 11 MFt költségvetési támogatás.

Lézeralkalmazások

Optikai mérés technika: A – korábban létrehozott – mobil (mikrobuszba épített) környezetvédelmi laboratóriumot kiegészítették aeroszolmérő műszerekkel. A 005/2000 sz. NKFP szerződés keretén belül 3 mérési kampányt végeztek 2004. júniusa és októbere között. – Új, kéthullámhosszú, négydetektoros (előre- hátraszórás mérő) részecske-analizátor berendezést fejlesztettek ki. Optimalizálták és tesztelték a berendezés részegységeit. – Továbbfejlesztették a fotodetektorok minősítésére és fotonstatisztikai kísérletekre korábban kidolgozott kvantumoptikai berendezést; új, nagy időfelbontású jelfeldolgozó elektronikát terveztek és építettek. – Kalibrálták a korábban kifejlesztett VELOSIZER fotonkorrelációs rendszert. Kiértékeltek a részecske-sokaságon szórt impulzussorok statisztikáját, mind az amplitúdó- mind az idő-eloszlás vonatkozásában. Megállapították, hogy ezen eloszlások felhasználhatók az aeroszol jellemzők meghatározására.

A hazai eredmények nemzetközi elismertségét jelzi, hogy 2004 szeptemberében Budapesten tartották az Európai Aeroszol Konferenciát.

Amorf szén rétegek: Korábbi kutatásaikat folytatva egy igen érzékeny technikát dolgoztak ki a Raman-szórás vizsgálatokra. A vizsgálandó szilárd szén fázisok felületét ezüst nanoszemcséket tartalmazó kolloid oldattal kezelve elérték, hogy a Raman szórás intenzitás jelentősen megnőtt és eddig nem tapasztalt új szórás csúcsok észlelése vált lehetővé. Ezáltal sokkal részletesebb információt nyertek a szilárd szén fázis kötő szerkezetéről. A felületnövelt Raman szórás ezáltal egy érzékenyebb minősítő módszerré vált.

Biokompatibilis vékonyrétegek fejlesztésével összefüggő kutatásaik keretében a nagy molekulásúlyú polietilén felületén gyorsatom (N, H, He) bombázással létrehozott felületi vékonyrétegek kötő szerkezeti tulajdonságainak változását határozták meg és összefüggést állapítottak meg a felületi vékonyréteg keménysége, kopásállósága és kötési sajátságai között.

Résztvevők: az SZFKI 14 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 78 MFt költségvetési támogatás, 88 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések).

Femtosekundumos lézertechnika és optikai vékonyrétegek

Napjaink lézerfizikájának egyik legizgalmasabb területe az attosekundumos ($1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$) időtartamú röntgenimpulzusok előállítása és ezek alkalmazása alapvető fizikai folyamatok vizsgálatára. Az első sikeres (külföldi) kísérletekben kb. 650 as időtartamú röntgenimpulzusokat sikerült előállítani a 10-25 nm-es hullámhossz tartományban, egy Ti-zafír alapú erősítő rendszer 7 fs-os lézerimpulzusaival nemesgázban keltett röntgen kontinuum spektrális szűrése révén. Az SZFKI-ban megvizsgálták a röntgen kontinuum spektrális szűrésére használt Mo/Si multirétegek diszperziós tulajdonságait, és kimutatták, hogy nem megfelelő rétegszerkezet alkalmazása esetén az előállított egyes attosekundumos impulzusok időtartama jelentősen növekedhet és az impulzusalak is jelentősen torzul.

Elméletileg és kísérletileg is kimutatták, hogy 2D fotonikus kristály szálak alkalmazásával lehetséges 1 nJ-nál kisebb energiájú lézerimpulzusokkal is 6 fs-nál rövidebb kompresszált fényimpulzusok előállítása.

Sikeresen állítottak elő 3 fs hosszúságú fényimpulzusok alakjának torzításmentes vizsgálatára alkalmas, autokorrelátorokban használható diszperziómentes osztótükröket a 400-1100 nm spektrumtartományra, amelyek a bécsi Technische Universität Wien és a németországi MPI

für Quantenoptik laboratóriumaiban kerültek alkalmazásra. Az MTA MFA kutatóival együttműködve nagy érzékenységű szenzor megvalósítására alkalmas integrált optikai Mach-Zehnder-interferométert fejlesztettek ki. Az MTA SZBK Biofizikai Intézetével együttműködve mikrostrukturált bevonatokat készítettek új elvű nanobiotechnológiai eszközökhöz.

Résztvevők: az SZFKI 4 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 31 MFt költségvetési támogatás.

Optikai egykristályok növesztése és minősítése

A sztöchiometrikus összetételű LiNbO_3 kristályok (LN) növesztésére használt $\text{Li}_2\text{O-Nb}_2\text{O}_5\text{-K}_2\text{O}$ ternér rendszerben azonosították a $\text{Li/Nb}\sim 1$ előállítására alkalmas oldatösszetétel tartományt. Az LN fázis létezési tartományában termoanalitikai és röntgendiffrakciós mérések alapján meghatározták a rendszer fázisdiagramját. A $\text{LiNbO}_3\text{-K}_2\text{O}$, LiNbO_3 eutektikum és az 50 mol% Nb_2O_5 -metszetek mentén azonosították az egyensúlyi folyadék-szilárd fázisösszetételeket. Meghatározták az LN kristályok törésmutatójának, fotorefrakciójának és a ferroelektromos doméninverzióhoz szükséges elektromos télerősségnek a Li/Nb aránytól és a fotorefrakció csökkentésére használt Mg adalék koncentrációjától való függését.

Megfelelően kialakított hőmérsékletgradiensben, Czochralski módszerrel megnövesztették a bárium-metaborát (BaB_2O_4) nemlineáris β kristály-fázisát, amely az olvadásponton metastabil, és amelyet korábban csak olvadék-oldatos módszerrel sikerült előállítani.

$\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$ (YAB) kristályokban spektroszkópiai és neutrondiffrakciós vizsgálatokkal meghatározták a lézeraktív Er^{3+} ionok beépülési környezetét (trigonális prizma szimmetriájú Y helyek, 10 mol% Er tartalom felett is aggregáció nélkül) és a rácsparaméter változásokat. YAB:Dy^{3+} kristályokban a ${}^4\text{F}_{9/2}$ szintről anomális hőmérsékletfüggésű (magasabb hőmérsékleteken hosszabb) lumineszcencia élettartamokat figyeltek meg vákuum-ultraibolya gerjesztés után, amit összetett energiaátvitellel modelleztek.

Abszorpciós és lumineszcencia színeképek alapján meghatározták $\text{Bi}_2\text{TeO}_5\text{:Er}$ kristályokban az Er^{3+} ionok teljes termdiagramját. A Judd-Ofelt számításokkal kapott paraméterek jó egyezést mutattak a kísérleti lumineszcencia adatokkal és több átmenetre lézerhatást jósolnak.

Az optikai kristályok kutatásában a témaválasztást mindig motiválták az alkalmazás céljai. A LiNbO_3 kristályok sokoldalú felhasználása közül a fotonikus célú kétdimenziós mikrostrukturák optimális kialakítása került előtérbe. A YAB belső frekvenciakétszerező "microchip" lézerek kialakítására alkalmas gazdarács. A β -BBO távoli ultraibolya tartományban is alkalmas nemlineáris optikai kristály, elsősorban lézerek frekvencia többszörözésére. A Bi_2TeO_5 holografikus tárolásra alkalmas önfixáló fotorefraktív kristály. Kristályaikat hazai és külföldi partnereik jelenleg is használják eszközfejlesztésekre. Ez 2004-ben 2,2 MFt kutatási támogatást eredményezett.

Résztvevők: az SZFKI 9 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 46 MFt költségvetési támogatás, 5,2 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

*Optikai kristályok karakterizációja és hibahelyeinek vizsgálata **

Meghatározták a $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$ minőségét csökkentő idegen fázisokat, valamint a mátrix és az adalékok effektív megoszlási hányadosait. Időfelbontásos spektroszkópiai módszerrel megállapították, hogy a Mo és Fe szennyezők jelentősen rontják a ZnWO_4 fénykihozatalát. A

KHo(WO₄)₂ optikai abszorpciós spektrumában azonosították a 4f¹⁰ elektron konfigurációjú Ho³⁺ vonalakat, és táblázatba foglalták a monoklin szimmetria miatt feloldott 159 energiaszint paramétereit. Különböző összetételű Mg-mal adalékolt LiNbO₃ UV és IR spektroszkópiai vizsgálatával megerősítették, hogy a beépülő Mg a fotorefrakciós küszöbkoncentrációnál kiszorítja az antisite Nb_{Li} ionokat. EPR mérésekkel kimutatták, hogy a Mg-mal és Ti-nal adalékolt kristályokban szomszédos ionokon csapdázott elektronok Ti_{Li}³⁺-Ti_{Nb}³⁺ vagy Ti_{Li}³⁺-Nb_{Nb}⁴⁺ bipolaronokat hozhatnak létre. Megállapították, hogy a Sr_xBa_{1-x}Nb₂O₆ és Li_{1-5x}Ta_{1+x}O₃ kristályokban az OH-rezgések x-függése egyszerű roncsolásmentes összetétel meghatározásra ad lehetőséget. Meghatározták a KHo(WO₄)₂, Bi₂(MoO₄)₃ és Pb₅(GeO₄)(VO₄)₂ kristálybeli hidroxidionok rezgési anharmonicitását, fononcsatolását, és az OH-dipólok orientációját. Megfigyelték, hogy az új kristályos BaCl₂:Ce foszfor a tárolt röntgenképek kiolvasására alkalmas intenzív foto- és röntgenlumineszcenciát mutat.

A négyhullámkeveréssel létrehozott dinamikus rácsok elméletébe bevezették a lokális és nem lokális válasz leírására a stabil, az oszcilláló és a kaotikus megoldás tartományainak meghatározására alkalmas komplex válaszfüggvényt. Kéthullámkeverés esetére a fényelnyelést is figyelembe vevő általános megoldás született a rács amplitúdójának profiljára és a kimenő nyalábok intenzitására.

Fáziskontraszt- és interferencia-mikroszkópos módszert dolgoztak ki a fotorefraktív rácsprofilok időbeli változásának megfigyelésére. Meghatározták ezüstháloid emulziókba írt fázishologramok felharmonikusainak amplitúdóját az átlagos expozíció és a beírt interferenciakép modulációjának függvényében. Pyrex, Tellurit, stb. üveghordozókba ionimplantálással sík- és csík-hullámvezetőket és Bragg-rácsokat írtak.

Tudománytörténeti felfedezésük szerint a “krisztallográfia” fogalom a “Crystallographia Hungarica”-ban már 1776-ban megjelent.

Résztvevők: az SZFKI 8 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 48 MFt költségvetési támogatás, 11,1 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

Nemlineáris és kvantumoptika

Atom mozgását erősen csatolt nyitott Fabry-Perot rezonátorban tekintve a Doppler-eltolódástól lényegesen eltérő sebességfüggés tapasztaltak az atom fényszórási tulajdonságaiban, amely a hagyományos Doppler-hűtéshez képest jobb hűtési és csapdázási tulajdonságokhoz vezet a rezonátor tengelyére merőleges irányban is. Két vagy több atomot téve a rezonátorba érdekes korrelált mozgás alakul ki, ami kollektív hűtéshez vezethet.

Kidolgozták degenerált rendszerekre a stimulált adiabatikus Raman átmenetek általános elméletét. Négyállapotú degenerált rendszerek állapotának preparálására terveztek egy olyan módszert, ami ötvözi az optikai pumpáláson és az adiabatikus átmeneten alapuló eljárások előnyös tulajdonságait.

A magas szintű ab initio elektronszerkezet-számítások terén két módszert dolgoztak ki az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásakor a rezgési kinetikusenergia-operátorban fellépő szinguláris tagok kezelésére.

Hanghullámokra transzszonikus Bose-Einstein kondenzátumokkal előállítható az eseményhorizont és a Hawking-sugárzás laboratóriumi analógja. Kiszámolták a szuperszonikus

áramlás feltételét és a Hawking-hőmérsékletet realiztikus kondenzátumok és hullámvezetők esetére.

Résztvevők: az SZFKI 12 munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 45 MFt költségvetési támogatás, 23,6 MFt (hazai és nemzetközi) pályázatok és együttműködések.

Az eredmények hasznosulása

Az elméleti (szilárdtestfizikai és optikai) kutatások nem hoznak ugyan közvetlen anyagi hasznot, de – elsősorban a graduális és posztgraduális képzés révén – jelentősen hozzájárulnak a legújabb eredmények hazai megismertetéséhez s ezzel az ország jövőbeli fejlődéséhez. A kísérleti kutatások mindegyike jövőbeli haszonnal kecsegtet; ezek közül külön is kiemelhetők a röntgen diffrakciós kutatások, a nanokristályos anyagok előállítása és vizsgálata, a lézerek mérés technikai alkalmazásai valamint az optikai kristályok előállítása és vizsgálata. Perspektivikus hasznukat jelzi a számos EU-, ill. NKFP projektben való részvétel. Néhány intézeti fejlesztésű eszköz, ill. anyag (speciális lézertükrök, lézeres részecske-számlálók, nemlineáris optikai kristályok, lágymágneses anyagok) már jelenleg is számos hazai területen felhasználásra került.

A kutatási eredmények gazdasági, ill. társadalmi hasznosulását különösen a Nemzeti Kutatási-Fejlesztési Programok segítik. Az eredmények gazdasági – társadalmi haszna ez esetben a felhasználóknál jelentkezik. Az intézet közvetett haszna az intézeti infrastruktúra fejlesztése.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Legfontosabb a KFKI utódintézetekkel való együttműködés. Az Intézet tagja a Budapesti Neutron Központnak, melyet a telephelyen levő kutatóreaktor sokoldalú felhasználására hozott létre három akadémiai intézet. Az SZFKI koordinálja a *KFKI Kondenzált Anyag Kutató Központ (KFKI-CMRC)* keretében végzett kutatásokat, melyben további három intézet (MFA, AEKI és RMKI) e területen dolgozó kutatócsoportjai vesznek részt. Az intézet kapcsolatban áll más akadémiai és egyetemi intézetekkel is (pl. a BME és az ELTE Fizikai tanszék csoportjával, továbbá a Debreceni Egyetem, a Pécsi és a Szegedi Tudományegyetem fizikai intézeteivel). A Nemzeti Kutatási Fejlesztési Program keretében végzett munka során jó kapcsolat alakult ki több kis és középvállalattal, valamint közintézménnyel (ANTSZ).

Nemzetközi kapcsolatok

Az SZFKI-nak a kutatás minden területén élő és szoros kapcsolatai vannak, főként európai és USA-beli egyetemekkel és kutatóintézetekkel. Ezt az is mutatja, hogy 2004-ben megjelent *publikációiknak* több mint 60%-ánál legalább az egyik *társszerző külföldi*. A nemzetközi tudományos életben való részvételt jól jellemzi az is, hogy az SZFKI kutatói nemzetközi rendezvényeken 2004-ben *86 tudományos előadást tartottak és 93 posztert mutattak be*.

A kapcsolattartás formái: rövid idejű kölcsönös látogatások, hosszabb idejű külföldi munkavégzés. 2004-ben 15 munkatárs dolgozott három hónapnál (közülük 8-an egy évnél)

hosszabb ideig külföldön. Örvedetesen megnőtt az intézetben egy hónapnál hosszabb ideig dolgozó vendégkutatók száma is: 11 vendég (8 országból) 25 hónapot töltött az intézetben.

Az intézet kutatói számos mobilitás típusú tematikus nemzetközi együttműködésben vettek részt. MTA egyezményen alapuló kétoldalú tematikus együttműködések keretében 12 ország 24 kutatócsoportjával folytattak közös kutatásokat. A témák nagy része a korábbi közös munkák folytatása. Közülük kiemelhetők az Orosz Tudományos Akadémia intézeteivel és a dubnai Magfizikai Kutatóközponttal neutron spektroszkópiai témában folytatott kutatások, melyek 2004-ben számos közös publikációt eredményeztek. Az együttműködést 2004 szeptemberében kétnapos tanácskozáson értékelték Budapesten a témákban résztvevők.

TÉT együttműködés keretében 10 országgal 16 témában folytattak közös kutatásokat. A korábbi hagyományos partnerek (német, angol, olasz, spanyol, francia) mellett eredményes együttműködés kezdődött török és ukrán kutatócsoportokkal. A török kapcsolat hasznosnak bizonyult a mágneses multirétegek előállításában és vizsgálatában. Az ukrán együttműködés keretében gázérzékelőkben használható, infravörös tartományban működő optikai szűrőket fejlesztettek ki. Az eredményeket négy közös publikációban ismertették. Intenzív együttműködés alakult ki egy osztrák kutatócsoporttal fotorefraktív anyagoknak fény- illetve neutronsugárzás hatására bekövetkező változásainak kutatásában. A közös munka eredményeképpen 2004-ben 1 elfogadott közlemény és 2 további kézirat született.

Felsőoktatás

Az SZFKI munkatársai több egyetemen vesznek részt a graduális és posztgraduális képzésben a szilárdtestfizika és - kisebb mértékben - az optika témakörében (ELTE, BME, SZTE, PTE). Legszorosabb a kapcsolat az ELTE TTK-n folyó fizikusképzéssel. Ez a részvétel rendszer és speciális előadások tartásában, laboratóriumi gyakorlatok vezetésében, diplomamunkások és doktoranduszok irányításában valósul meg.

1989 óta működik a KFKI telephelyén az ELTE Kihelyezett Fizika Oktatási Laboratóriuma, s ezen belül az SZFKI-ban a Szilárdtestfizikai-Kvantumelektronikai Labor. Az itt beállított laboratóriumi mérések 1991 óta a kötelező fizikus laboratóriumi gyakorlatok részévé váltak, de rendelkezésre állnak további, emelt szintű gyakorlatok is, melyek esetenként hazánkban egyedülálló metodikák megismerését teszik lehetővé (pl. neutronfizikai mérések). A labor-mérések nagymértékben támaszkodnak a kutatóintézeti háttérre (anyagminták, cseppfolyós He, lézertechnika, stb.). Az elmúlt években a laborgyakorlatokba bekapcsolódtak a BME mérnök-fizikus hallgatói is. Az intézet neutron spektroszkópiai csoportja az elmúlt nyáron is fogadott francia egyetemi hallgatókat nyári gyakorlatra.

2004-ben az intézet 41 kutatója (a kutatók 37 %-a) vett részt az egyetemi oktatásban, rendszer és speciális előadások tartása, továbbá szemináriumok és laborgyakorlatok vezetése formájában. Az intézetben 7 diplomamunka készült el, 1 akadémiai doktori és 5 doktori (PhD.) disszertációt védtek meg. 40 doktori ösztöndíjas dolgozott disszertációja elkészítésén.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatások anyagi fedezetét - az alapellátáson túlmenően - 2004-ben is lényegében az elnyert hazai és külföldi pályázatok biztosították. Az intézet kutatói egyebek között 45 OTKA, 5 OMFB/OM *hazai pályázat* megvalósításában vettek részt. A Nemzeti Kutatási Fejlesztési Program két projektjében az SZFKI koordinátor, további öt projektjében közreműködő.

Említésre méltó - kutatóik szakmai elismerését jellemzi - hogy 2004-ben az intézetnek 6 Bolyai ösztöndíjasa volt, egy kutatója pedig elnyerte a Talentum Díjat.

Az elmúlt években jelentősen nőtt a *nemzetközi forrásokból* támogatott kutatások jelentősége. Az SZFKI 2004-ben az *EU 5. Keretprogram* 8 projektjében vett részt közreműködőként. A projektek nagy része az emberi erőforrás jobb kihasználását célzó horizontális programba tartozott. Közülük legfontosabb a KFKI – Kondenzált Anyag Kutató Központ (KFKI-CMRC) által elnyert Centre of Excellence pályázat volt, melyben a KFKI telephely négy akadémiai intézete vett részt. A 2004-ben lezárult projekt keretében 52 vendégkutató dolgozott 1 hónapnál hosszabb ideig a Központban, 12 konferencia vagy workshop szervezésére került sor. Az intenzív együttműködés 109 nemzetközi folyóiratban megjelent cikket eredményezett, melyek szerzői 23 ország 107 intézetéből kerültek ki.

A 2002-ben indult EU 6. Keretprogramban eddig az intézetnek 4 pályázata volt eredményes. Külön említést érdemel egy 47 intézmény részvételével végzett integrált projekt az olvadékok megszilárdulásának elméleti és kísérleti vizsgálatáról, melyet az European Space Agency (ESA) pályázatai egészítenek ki. Egy másik sok résztvevős projekt a budapesti kutatóreaktorhoz való hozzáférést segíti elő.

2004-ben több nemzetközi projekt fejeződött be. Egy NATO Science for Peace project keretében hat laboratórium együttműködése révén távoli ultraibolya tartományban működő lézert sikerült kifejleszteni. Az International Atomic Energy Agency (IAEA) által támogatott pályázat keretében üzembe helyeztek egy 2D detektort. Kísérletileg igazolták a mágneses nyalábfókuszálás elvét, tekintettel a jövőbeni módszeres gyakorlati alkalmazásra és átfogó modellszámításokat készítettek görbített illetve konvergáló szupertükör bevonatú neutron-vezetők viselkedésére.

Két projektet bilaterális egyezmény keretében egy angol, illetve egy német intézmény finanszíroz.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak és más bemutatható eredmények

1. Penc K, Shannon N, Shiba H: Half-magnetization plateau stabilized by structural distortion in the antiferromagnetic Heisenberg model on a pyrochlore lattice, Phys Rev Lett, 93, 197203/1-4, 2004
2. Legeza Ö, Sólyom J: Quantum data compression, quantum information generation, and the density-matrix renormalization group method, Phys Rev B, 70, 20511/1-7, 2004
3. Pleimling M, Iglói F: Out-of-equilibrium dynamics at surfaces: Cluster dissolution and non-algebraic correlations, Phys Rev Lett, 92, 145701/1-4, 2004
4. Csordás A, Szépfalussy P, Szőke É: Clustering of Fermi particles with arbitrary spin, Phys Rev Lett, 92, 090401/1-4, 2004
5. Korzhavyy PA, Vitos L, Andersson DA, Johansson B: Oxidation of plutonium dioxide, Nature Materials, 3, 225-22, 2004
6. Újfalussy B, Lazarovits B, Szunyogh L, Stocks GM, Weinberger P: Ab initio spin dynamics applied to nanoparticles: canted magnetism of a finite Co chain along a Pt(111) surface step edge, Phys Rev B, 70, 100404(R)/1-4, 2004

7. Gránásy L, Pusztai T, Börzsönyi T, Warren J A, Douglas JF: A general mechanism of polycrystalline growth, *Nature Materials*, 3, 645-650, 2004
8. Wu Z, Chen Z, Du X, Logan JM, Sippel J, Nikolou M, Kamarás K, Reynolds JR, Tanner DB, Hebard AF, Rinzieré AG: Transparent, conductive carbon nanotube films, *Science* 305, 1273-1276, 2004
9. Tóth-Katona T, Gleeson JT: Conductive and dielectric defects, and anisotropic and isotropic turbulence in liquid crystals - electric power fluctuation measurements, *Phys Rev E*, 69, 016302/1-10, 2004
10. Buka Á, Dressel B, Kramer L, Pesch W: Isotropic convection scenarios in an anisotropic fluid, *Phys Rev Lett*, 93, 044502/1-4, 2004
11. Jánossy I, Kósa T, Gliding of liquid crystals on soft polymer surfaces: *Phys Rev E*, 70, 052701/1-4, 2004
12. Bakonyi I, Péter L, Rolik Z, Kiss-Szabó K, Kupay Z, Tóth J, Kiss LF, Pádár J: Decomposition of the giant magnetoresistance of multilayers into ferromagnetic and superparamagnetic contributions, *Phys Rev B*, 70, 054427/1-10, 2004
13. Hernando A, Marin P, López M, Kulik T, Varga LK, Hadjipanayis G: Size dependence of coercivity in nanostructured soft alloys, *Phys Rev B*, 69, 052501/1-4, 2004
14. Cser L, Török Gy, Krexner G, Prem M, I. Sharkov I: Neutron holographic study of palladium hydride, *Applied Phys Letters*, 5, 1149-1152, 2004
15. Kalman GJ, Hartmann P, Donkó Z, Rosenberg M: Two dimensional Yukawa liquids: correlation and dynamics, *Phys Rev Lett*, 92, 065001/1-4, 2004
16. Donkó Z, Hartmann P, Kalman GJ: Collective modes of quasi-two-dimensional Yukawa liquids, *Phys Rev E*, 69, 065401(R)/1-4, 2004
17. Gál P, Oszetzky D, Czitrovsky A, Szigethy D: Monitoring of the aerosols by a mobile laboratory within the city of Budapest, *Journal of Aerosol Science*, 35, 267-269, 2004
18. Pálfalvi L, Hebling J, Almási G, Péter Á, Polgár K, Lengyel K, Szipőcs R: Nonlinear refraction and absorption of Mg doped stoichiometric and congruent LiNbO₃, *J Appl Phys*, 95, 902-90, 2004
19. Bencs L, Horváth V, Varga I, Beregi E, Kántor T: Analysis of yttrium aluminum borate crystals by solution-based methods: inductively coupled plasma atomic emission spectrometry and flame atomic absorption spectrometry, *Spectrochim Acta*, B59, 151-159, 2004
20. Corradi G, Meyer M, Kovács L, Polgár K: Gap Levels of Ti³⁺ on Nb or Li Sites in LiNbO₃:(Mg):Ti Single Crystals and their Effect on Charge Transfer Processes, *Applied Physics B*, 7, 607-614, 2004
21. Domokos P, Vukics A, Ritsch H: Anomalous Doppler effect and polariton-mediated cooling of two-level atoms, *Phys Rev Lett*, 92, 103601/1-4, 2004
22. Kárpáti A, Kis Z, Ádám P: Engineering mixed states in a degenerate four-state system, *Phys Rev Lett*, 93, 193003/1-4, 2004

VI. A kutatóhely 2004. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	172	Ebből kutató ² :	117
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			43
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			250
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			247
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	202	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	3
nemzetközi együttműködés keretében:	139	SCI által regisztrált folyóiratban:	191
összesített impakt faktor:	401,464	összes hivatkozás száma ⁴ :	2290
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1434
Megjelent könyv:	-	könyvfejezet:	5
<i>ebből</i> magyar nyelven könyv:	-	könyvfejezet:	-
		jegyzet:	2
		jegyzet:	2
Megvédett PhD értekezés:	5	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	-	Megadott szabadalmak száma:	-
<i>ebből</i> külföldön:	-	<i>ebből</i> külföldön:	-
Értékesített szabadalmak száma:			-
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma:	86	poszterek száma ⁶ :	93
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			41
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	24	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	9
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:			782 MFt
Beruházási támogatás:	13 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁸ :	21
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			45
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	90 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			12
NKFP:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	86 MFt
Egyéb:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	50 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ⁹ :			-
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	- MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹⁰ :			14
EU forrásból:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	89 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	21 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹¹ :			15
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹² :			6 MFt

EZ AZ OLDAL NINCS!