

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KUTATÓHELYEINEK  
2007. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

I.

Matematika és természettudományok

Budapest

2008

A Magyar Tudományos Akadémia matematikai és természettudományi kutatóhelyeinek  
beszámolóí alapján – az intézmények vezetőinek aktív közreműködésével –  
szerkesztették az MTA Titkársága  
Kutatóintézeti Főosztályának, valamint a  
Támogatott Kutatóhelyek Irodájának a munkatársai

Javított, elektronikus kiadás

Banczerowski Januszné mb. főosztályvezető

Herczeg György  
Redler László

Idei Miklós

ISSN 1418-835X

F.k.: Banczerowski Januszné

Akaprint Kft. F.v.: Freier László

## TARTALOMJEGYZÉK

Előszó .....	5
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések .....	7

### *Matematikai és természettudományi kutatóintézetek*

Atommagkutató Intézet .....	11
Földrajztudományi Kutatóintézet .....	24
Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet .....	34
Geokémiai Kutatóintézet .....	45
Izotópkutató Intézet .....	55
Kémiai Kutatóközpont .....	64
Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet .....	66
Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézet .....	76
Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézet .....	88
Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet .....	98
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet .....	110
KFKI Atomenergia Kutatóintézet .....	121
KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet .....	134
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet .....	149
Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet .....	165
Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet .....	177
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet .....	194

### *Matematikai és természettudományi támogatott tanszéki kutatóhelyek*

BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport .....	211
BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport .....	215
BME Fémtechnológiai Kutatócsoport .....	219
BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport .....	223
BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport .....	227
BME Irányítástechnológiai Kutatóintézet .....	231
BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport .....	235
BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport .....	239
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport .....	243
BME Sztochasztika Kutatócsoport .....	247
BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport .....	251
DE Homogén Katalízis Kutatócsoport .....	255
DE Számelméleti Kutatócsoport .....	259
DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport .....	262
ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport .....	266
ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport .....	270
ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport .....	274

ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport .....	278
ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport .....	282
ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	286
ME Anyagtudományi Kutatócsoport .....	290
ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport .....	294
MTM Paleontológiai Kutatócsoport.....	298
PE Levegőkémiai Kutatócsoport.....	302
PPKE-SE Neurobiológiai és Infobionikai Plaszticitás Kutatócsoport .....	306
SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport .....	310
SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport .....	314
SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport .....	318
SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport.....	322
SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport .....	326
SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport (Társult tag) .....	330
SZTE Reakciókinetikai Kutatócsoport (Társult tag).....	334

## ELŐSZÓ

A Magyar Tudományos Akadémia kutatóhelyeinek éves beszámolója mindig jelentős határkő a tudományos közösség életében. A beszámoló kötet, a – „sárga könyv” – összefoglalja intézeteink és támogatott kutatóhelyeink kutatási eredményeit, értékelő adatait, jellemző mutatóit. E többkötetes, közgyűlési éves beszámoló kiadványok elérhetők az MTA honlapján is ([www.mta.hu](http://www.mta.hu)), mind a döntéshozók, mind a tudományos közösségek, mind a tudomány iránt érdeklődő széles közvélemény számára. Az utóbbi években külön, színes kötetben adjuk közre a kormányzati-, gazdasági-, üzleti szféra érdeklődésére is számot tartó, a gyakorlati alkalmazás szempontjából ígéretes tudományos eredményeket.

A 2007-es év alkotó, termékeny és eredményes esztendeje volt az akadémiai kutatásnak. A változó körülményekhez igazodva az MTA vezetése mellett intézeteink, kutatóhelyeink is komoly erőfeszítéseket tettek a tudományos kutatás feltételeinek biztosítására, éltek a bővülő külföldi lehetőségekkel, és igyekeztek ezekből pótolni az elapadó hazai kutatási forrásokat. A változó körülmények között a kutatók, kutatócsoportok megőrizték, sőt fokozták hazai és nemzetközi elismertségüket tudományterületükön. Ezt igazolja a publikációk száma, idézettsége és a nemzetközi tudományos bizottságokban, folyóiratok szerkesztőbizottságában betöltött számos tisztség és elismerés. Az elmúlt években a kutatóhálózat – a jelzett gondok ellenére is – sikeresen tudott versenyezni az elsősorban alkalmazott kutatási feladatok megoldását igénylő hazai és nemzetközi pályázatokban, így különösen jelentős ezen források gyarapodása. A kutatóhálózat megőrizte működőképességét a költségvetési támogatás szűkössége, a pályázati finanszírozás nehézkes, bürokratikus jellege ellenére is.

Kutatóintézeteink összes dolgozójának átlagléttszáma alig változott: 2006-ban 4345 fő volt, 2007-ben pedig 4294, ez mintegy 1%-os csökkenés. Ezen belül a kutatók átlagléttszáma ugyanakkor 1%-kal növekedett. Az összes kutatónak mintegy 30%-a 35 év alatti. E mutató kiválóan jelzi az Akadémia tudatos tudománypolitikáját: a hazai K+F hálózatban a legtöbb fiatal kutató itt dolgozik. Ehhez döntő mértékben járult hozzá az 1992 óta kiválóan működő fiatal kutatói támogatási rendszer.

Az összes tudományos publikáció száma 2007-ben 6429 volt. Ez mintegy 4,5%-os növekedést mutat az előző évihez képest. Az összes tudományos publikáció 22%-a nemzetközi együttműködés keretében készült. A referált nemzetközi folyóiratokban megjelent cikkek száma 2007-ben összességében nem változott, és az összes publikáció mintegy háromnegyedét teszi ki. Az egy kutatóra eső összes publikáció száma 2007-ben 2,6 (élettudományoknál: 1,44, matematika és természettudományoknál: 1,9, társadalomtudományoknál: 4,7). 2007-ben az élettudományi, valamint a matematikai és természettudományi területen együttesen 12%-al növekedett a publikációk összesített impakt faktora. A nemzetközi rendezvényeken tartott előadások száma 4%-kal növekedett az előző évhez viszonyítva. Nemzetközi elismerésünket bizonyítja, hogy a kutatók mintegy 24%-a tagja valamilyen nemzetközi tudományos bizottságnak, és 19%-a nemzetközi folyóirat szerkesztői bizottságnak.

Jelentős változásokat hozott a kutatóhálózat életében az akadémiai reform folyamata. Az MTA intézményei közfeladatot látnak el, eredményeikről az Akadémia folyamatosan számot ad a Kormánynak, illetve az Országgyűlésnek. Az elmúlt években megindult az intézethálózat profiljának korszerűsödése, és e tendencia várhatóan folyamatos marad. Az intézetekben művelt kutatások interdiszciplinaritása tovább szélesedett, megteremtve ezzel a lehetőségét a kutatóhelyek közötti együttműködések számának növeléséhez. A hálózatos szerveződések új

perspektívákat nyitottak intézeteink számára. Megnőtt az intézetek kapcsolatrendszeri mobilitása, jobb lehetőség nyílt multidiszciplináris társulások együttműködések megvalósulására, közös pályázásokra és különösen a nemzetközi együttműködések területén javultak esélyeik is. Fontos azt is megjegyezni, hogy erősödtek a kutatási eredmények hasznosítására irányuló törekvések.

Az Akadémia apparátusának szerkezeti átalakítása is segítette az intézethálózat működtetését. A 2007-ben megalakult egységes Kutatóintézeti Főosztály hatékonyabbá, közvetlenebbé és kevésbé bürokratikusá tette az MTA vezetése és a kutató intézmények közötti kapcsolatot. Az újonnan létrejött Kutatásfejlesztési és Innovációs Főosztály fő feladata a kutatási eredmények hasznosításában, a tudástranzfer elősegítésében jelentett előrelépést.

Az MTA intézethálózata az elmúlt évtized során jelentős változáson ment keresztül. Ez vitathatatlan még akkor is, ha erről többen nem akarnak tudomást venni. Az intézetek kutatói létszáma a konszolidáció végrehajtásakor erőteljesen lecsökkent, majd az ezt követő szerény növekedés során számottevően megfiatalodott. A kutatási profilok korszerűsödését számos tény dokumentálja, a hálózat számtalanszor bebizonyosodott rugalmassága alapján joggal remélhetjük, hogy a szakmai követelményekhez történő igazodás a jövőben is folytatódik. A hálózat sok szempontból őrzi az alapkutatásokban hagyományosan birtokolt erős pozícióját, ugyanakkor tevékenységének jelentős részévé vált a felsőoktatási intézményekkel megvalósuló szoros kapcsolat, a graduális és posztgraduális oktatásban való részvétel. Az MTA vezetése azt szorgalmazza, hogy az akadémiai kutatók oktató tevékenységük súlypontját a doktorképzésben való közreműködésre helyezték.

Jelentős átalakuláson ment keresztül az Akadémia egyik legfontosabb kutatási szegmense, az egyetemeken és a közgyűjteményekben tevékenykedő támogatott kutatóhelyek rendszere. A tavalyi beszámolási év volt az első lezárt kutatási időszak, amelyről a csoportok – immár kisebb létszámmal, de egyszersmind hatékonyabb szervezetben és megnövekedett támogatással végzett – munkájuk eredményeiről számolhattak be a közgyűlési kiadványainkban.

A beszámoló kötetei minden bizonnyal hitelesen tükrözik a kutatóhálózatban az elmúlt esztendőben végzett munkát, az elért eredmények elméleti és gyakorlati hasznát. A 2007-es év – dacára gondjainknak és körülményeinknek – sikeresen zárult. Nagy jelentőségű az is, hogy az akadémiai vezetésnek ebben az ingadozó, csábításokkal és fenyegetésekkel teli környezetben sikerült megőriznie az MTA kutatóhálózatának integritását. Megmaradtak az intézetek, megújult a kutatócsoporti hálózat, s mindkettő az MTA felügyelete alatt maradt. Az elkövetkezendő időszakban még számos nyitott kérdés vár tudományos megválaszolásra. Ezért az utóbbi években erősödött a Kormányzat igénye az Akadémiával megvalósuló, a kutatóhálózat eredményeire épülő stratégiai együttműködés bővítésére, amit a tárcákkal és más intézményekkel megkötött együttműködési megállapodások, megbízások is mutatnak.

Több mint 180 esztendő története során az MTA – örködvén az elért eredményeken, megtartva értékeit – nem csupán kereste, hanem meg is találta az útját és módját annak, hogy a mindenkor társadalmi kihívásokra adekvát választ adjon, s ezáltal fermentálja legyen a hazai tudományos fejlődésnek, segítse a magyar társadalom egészének, ezen belül a kutatás és innováció folyamatának, valamint a felsőoktatás állandó megújulását, s a felgyülemlett társadalmi problémák megoldását.

Budapest, 2008. május

Meskó Attila

## A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

Minden táblázatban szereplő adatot az intézetek vagy a csoportok adták meg. Több éves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg lett feltüntetve forintban.

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

<sup>1</sup> Az éves gazdasági beszámolóban szereplő átlagos statisztikai állományi létszám

<sup>2</sup> A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2007 év végi tényleges átlagléttszáma. Az átlagléttszámba beletartoznak a részmunkaidőben foglalkoztatottak is. Ezekben az esetekben a részmunkaidősök létszáma a ledolgozott órák alapján lett teljes munkaidős létszámmá átszámítva.

<sup>3</sup> Mindazon publikációk száma, amelyeket az illető kutatóhely második indexszel megjelölt helyen számbavett szerzője jelentetett meg (tehát azok és csak azok cikkei, akik 2007-ben az intézet állományában voltak). A publikációkba beletartoznak: a tudományos és ismeretterjesztő munkák, tanulmány, cikk, könyv, könyvfejezet, jegyzet, atlasz, tematikus térkép.

<sup>4</sup> Mindazon tudományos publikációk száma, amelyeket az illető kutatóhely második indexszel megjelölt helyen számbavett szerzője jelentetett meg, és amelyek megfelelnek a TPA ajánlásában megadott feltételeknek és a publikáción a szerző kutatóhelyeként szerepel a kutatóhely neve.

<sup>5</sup> A folyóiratok 2006 évi impakt faktorait használtuk.

<sup>6</sup> A tárgyévben a kutatóhely állományában lévő kutatóknak az adott kutatóhelyen vagy jogelődjében az utolsó 15 évben (1992-2007 között) született cikkeire való 2007 évben történt hivatkozások száma (az egyszerű hivatkozás, valamint egy tudományos munkáról szóló recenzió tartozik ide), az MTA TPA számára leadott listák alapján. A bibliográfiai adatként szereplő művek száma itt nem szerepel.

<sup>7</sup> Ide csak a tudományos könyveket soroljuk.

<sup>8</sup> A tárgyévben kiállított oklevelek alapján.

<sup>9</sup> Találmány ill. szabadalom alatt értendők a Szabadalmi törvény hatálya alá tartozó szellemi alkotások, így a növény- és állatfajta oltalom is.

<sup>10</sup> Külön az előadások és külön a poszterek száma, abban az esetben is, ha a konferencia kiadványban nem jelentek meg, de dokumentált formában ellenőrizhetők.

<sup>11</sup> Itt csak a kormány szintű vagy ezzel ekvivalens országos és nemzetközi, nem megbízási díjért végzett szakpolitikai tanácsadó tevékenységet, bizottsági részvételt soroltuk fel.

<sup>12</sup> Mindazon személyek száma, akik hazai felsőoktatási intézményben rendszeresen (nem feltétlen heti rendszerességgel), tantervi keretek között oktatnak. A külföldi egyetem számára végzett oktatási tevékenységet, a felkérésre tartott előadásokat és a szakdolgozat, diplomamunka, PhD-téma vezetését a beszámoló III., illetve IV. pontjában találjuk. Az adatok a 2006/2007-es tanév második és a 2007/2008-as tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

<sup>13</sup> Nem a tanórák, hanem a 2006/2007-es tanév *második* és a 2007/2008-as tanév *első* szemeszterében megtartott elméleti és gyakorlati kurzusok száma. Kurzus alatt az egy személy által azonos címen meghirdetett, egy félév során tartott előadássorozatot, illetve gyakorlati foglalkozásokat értjük.

<sup>14</sup> A kutatóhely állományában lévő kutatók által felsőfokú oktatási intézményben tartott, hivatalosan bejegyzett reguláris és speciális előadások valamint gyakorlatok 2006/2007-es tanév *második* és a 2007/2008-as tanév *első* szemeszteri együttes óraszám. Itt nem tüntettük fel az intézményben TDK, diploma illetve PhD-hallgatók által eltöltött, vagy rájuk fordított óraszámot.

<sup>15</sup> A 2007 évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatást csökkentettük a következő tételekkel:

- központi beruházási támogatás,
- felújítási támogatás,
- más tárcáktól bármilyen céllal átadott támogatás,
- OTKA Programok támogatás

összegével.

<sup>16</sup> 2007-ben az MTA keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyek száma.

<sup>17</sup> Az utolsó három év átlaga.

<sup>18</sup> Ebbe a kategóriába tartoznak azoknak a kutatási célú megbízásoknak a bevételei, amelyeknél a pályázatok kiírója magyarországi szervezet. (Pl. Innovációs Alap, Agrártámogatások, Strukturális alapok, Kohéziós alap stb.) Ezeket a bevételeket áfa nélküli összegben és alvállalkozói teljesítés nélkül vettük figyelembe.

<sup>19</sup> A Nemzeti Fejlesztési Terv I. keretében (GVOP, stb.) elnyert támogatások.

<sup>20</sup> Ebbe a kategóriába tartoznak azoknak a kutatási célú megbízásoknak a bevételei, amelyeknél a pályázatok kiírója nem magyarországi szervezet. Ezeket a bevételeket ÁFA nélküli összegben és alvállalkozói rész nélkül vettük figyelembe.

<sup>21</sup> OTKA, NKTH és egyéb pályázati pénzekből az az összeg, amelyet a kutatóhely koordinátorként más intézményekhez, tanszékekhez, vállalkozókhoz továbbítottak a tárgyévben.



MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZETEK



## ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET

4026 Debrecen, Bem tér 18/c, 4001 Debrecen, Pf. 51.

Telefon: 06 (52) 509–200, Fax: 06 (52) 416–181

e-mail: director@atomki.hu; honlap: http://www.atomki.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet alapfeladatai 2007-ben nem változtak; ezek 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

#### *Részecskefizika*

Jelentős előrehaladást értek el a második kvantumszindinamikai sugárzási korrekciók számítására alkalmas általános módszer kifejlesztésében. Sikerült egy igen egyszerű és a perturbációs számítás tetszőleges rendjében alkalmazható eljárást megadni a többszörös lágy és a kollineáris partonsugárzást leíró közelítő mátrixelemek kiszámolására. Az eljárás különlegessége, hogy sem a lágy, sem a kollineáris partonsugárzásra vonatkozó képlet nem tartalmazza a másik járulékait. [Ezek az eredmények egy nemzetközi együttműködésben születtek, két Atomki-tag részvételével. Az intézeti ráfordítás 6,7 M Ft, amiből 3,7 M Ft pályázati forrásból származik. Rövid jelöléssel: Nagyobb csoport (2) fő, 6,7 (3,7) M Ft]

A CERN-i ATLAS együttműködés keretében részt vettek a CSC-analízisekben (Computer System Commissioning). A „műontrigger”-csoport keretén belül a dimüontriggeren végzett vizsgálatok bekerülnek az ATLAS műontrigger CSC-tanulmányába. Analíziseket végeztek a topkvarkos események triggerelésével kapcsolatban is, ami az ATLAS topcsoport egyik cikkébe fog belekerülni. [ATLAS project (1) fő, 3 (0) M Ft]

#### *Magfizika*

A franciaországi nemzeti nehézion-laboratóriumban (GANIL) végzett kísérletben megmutatták, hogy a neutroninstabilitási vonal közelében fekvő, korábban kétszeresen zárt héjúnak hitt  $^{42}\text{Si}$  atommag első gerjesztett állapotának az energiája a környező magokhoz képest alacsony, ami egyértelmű jele annak, hogy nincs héjlezáródás. Az  $N=8$  és az  $N=20$  után az  $N=28$  héjzáródás megszűnésére utaló jeleket is sikerült találni, ami arra utal, hogy nagy  $N-Z$  esetén a héjszerkezet változása általános jelenség. [37 (4) fő, 20 (0) M Ft]

Holland-magyar-japán együttműködésben vizsgálták az izoskalár dipólus óriásrezonancia (ISGDR) direkt proton- és neutronkibocsátással történő bomlását a gronigeni KVI-ben. A rezonancia bomlási csatornáira nyert kísérleti parciális erősségfüggvényeket elméleti számítások eredményeivel hasonlították össze, és így a rezonancia mikroszkopikus

szerkezetére először kaptak információkat. Magasabb gerjesztési energiákon a fenti dipólus óriásrezonancián kívül egy új, szélesebb rezonanciaszerkezetet is megfigyeltek. A szögeloszlás-adatok alapján az új rezonancia kvadrupólus jellegűnek adódott. Becslések szerint ez a rezonancia a kvadrupólus óriásrezonancia első felharmonikus módusa lehet. [13 (5) fő, 20 (0) M Ft]

A Stony Brook-i Egyetemmel együttműködve vizsgálták a  $^{105}\text{Rh}$  körüli királis forgást mutató atommagok tartományának határait. A  $^{105}\text{Ag}$  atommag nagyspinű állapotait fúziós–párolgási reakcióban gerjesztve új forgási sávokat találtak, és korrigálták a kiralitás szempontjából érdekes konfigurációjú, korábban is ismert forgási sáv elhelyezését a nívósémában. A tartományra jellemző királis forgásisáv-pár nem volt kimutatható a kísérletben, amiből arra következtek, hogy egyrészt ez az atommag már kívül esik azon a királis tartományon, másrészt a gamma-deformációval szemben lényegesen keményebb, mint a szomszédos  $^{106}\text{Ag}$  atommag. Ugyanakkor egy újonnan talált más konfigurációjú forgásisáv-pár királis forgásra jellemző tulajdonságokat mutat a  $^{105}\text{Ag}$  atommagban. [13 (3) fő, 20 (0) M Ft]

Bebizonyították, hogy a p+p szórási reakció „trójai faló” elnevezésű módszerrel való mérésével a Coulomb- és a nukleáris szórás interferenciája kiküszöbölhető. [18 (5) fő, 11 (1) M Ft]

A  $^3\text{He}(\alpha,\gamma)^7\text{Be}$  reakció hatáskeresztmetszetének alacsony energián való mérésével feloldották az irodalmi adatokban található ellentmondást, és a  $^7\text{Be}$  és  $^8\text{B}$  napneutrínó-fluxus ebből a reakcióból származó hibáját mintegy 8%-ról 3% alá szorították le. [30 (4) fő, 11 (1) M Ft]

Az asztrofizikai p-folyamat szempontjából lényeges több magreakció [ $^{112}\text{Sn}(\alpha,\gamma)^{116}\text{Te}$ ,  $^{112}\text{Sn}(\alpha,p)^{115}\text{Sb}$ ,  $^{70}\text{Ge}(p,\gamma)^{71}\text{As}$ ,  $^{76}\text{Ge}(p,n)^{76}\text{As}$ ] hatáskeresztmetszetét mérték meg, és levonták az asztrofizikai konzekvenciákat. [16 (5) fő, 22 (2) M Ft]

Két egyrészcsekés neutronállapot energiáját határozták meg az  $^{23}\text{O}$  atommagban az  $^{22}\text{O}(d,p)^{23}\text{O}^* \rightarrow ^{22}\text{O} + n$  folyamat segítségével. Ennek felhasználásával megmagyarázták, hogy miért nem kötöttek az  $^{24}\text{O}$ -nél nehezebb oxigénizotópok, és a méréssel közvetlen bizonyítékot szolgáltatott arra, hogy a stabilitási sávtól távol, a 20-as neutronszám mágikuságát felváltja a 16-osé. [36 (5) fő, 11 (1) M Ft]

Megmérték az alapállapot és az első gerjesztett állapot közötti átmenet erősségét a  $^{26}\text{Ne}$  atommagban. [26 (2) fő, 11 (1) M Ft]

Meghatározták a  $0_2^+$  izomer állapot élettartamát  $^{12}\text{Be}$  atommagban. [34 (1) fő, 11 (1) M Ft]

Új módszert adtak a kvantummechanikai szórásprobléma megoldására. A hullámfüggvény nehezen megadható aszimptotikus viselkedését azzal küszöbölik ki, hogy a Schrödinger-egyenletet a komplex koordinátatérbe transzformálják. A transzformált hullámfüggvényt már egyszerűen lehet közelíteni. A módszert általánosították hosszú hatótávolságú potenciálok esetére is. Az eljárást a  $^3\text{H}(p,n)^3\text{He}$  magreakcióra próbálták ki, sikerrel. [3 (1) fő, 7,5 (0,5) M Ft]

Az atommagok törzs+alfa-részecske jellegű klaszterállapotainak kvantitatív leírását adták az U(4/12) szuperszimmetrikus séma keretében. Ehhez meghatározták hat 18, 19 és 20 tömegszámú atommag elektromos kvadrupólus átmeneteit és az e magok között lejátszódó egynukleon-transzfer reakciók spektroszkópiái faktorait. Azt találták, hogy a szuperszimmetrikus séma alkalmas a hat atommag alfa-klaszter-állapotainak egységes kezelésére. Első alkalommal sikerült egy atommagszerkezeti szuperszimmetrikus modellt egy szupermultiplett két fermionhoz tartozó szektorára kiterjeszteni. [3 (2) fő, 4 (0) M Ft]

Vizsgálták a komplex energiájú kvázirészecskék alkalmazhatóságát magfizikai számolásokban. A neutronban gazdag oxigén- és nikkelizotópokra meghatározták a releváns komplex kvázirészecske-rezonanciákat. A formalizmust quadrupólus vibrációk leírására is alkalmazták, és azt találták, hogy ha a korrelált állapot viszonylag hosszú életű kvázirészecske-rezonanciákból épül fel, akkor fizikailag a kétkvázirészecskés állapot is értelmes lesz. [1 (1) fő, 6,5 (0,5) M Ft]

Egzaktul megoldható PT-szimmetrikus (egyidejű tér- és időtükrözéssel szemben invariáns) potenciálok vizsgálata során elsőként számolták ki analitikusan a trigonometrikus és a hiperbolikus Rosen–Morse-potenciálok kötött állapotainak normálási konstansát és pszeudonormáját. A trigonometrikus Rosen–Morse- és a korábban vizsgált trigonometrikus Scarf-potenciált alkalmazták új egzaktul megoldható nem centrális PT-szimmetrikus potenciálok származtatására 3 dimenzióban, és rámutattak jelentőségükre a PT-szimmetria spontán sérülésében. [1 (1) fő, 5,4 (0,4) M Ft]

Összefonódott állapot párok felhasználásával unitér időfejlődésű operátorok megkülönböztethetőségére adtak egyszerű algoritmust, egyben alsó időkorlátot is találva az ortogonális állapotok elérésére. [2 (1) fő, 3 (0) M Ft]

Valódi háromrészecskés spinbeli összefonódottságot térképeztek fel összefonódottsági tanúoperátorok segítségével szabad Fermi-gázban zérus hőmérsékleten. A háromfermion-konfigurációt jellemző azon távolság, melyen belül a részecskék valódi összefonódottságot mutatnak, összemérhetőnek adódott egy összefonódott fermionpár maximális távolságával. [1 (1) fő, 3 (0) M Ft]

A NAÜ orvosi és ipari alkalmazások szempontjából nagy jelentőségű nukleáris adatbázisának bővítése érdekében protonnyalábokkal Sc, Mn, Co, Zr, Mo, Rh, Cd.,  $^{116}\text{Cd}$ , Cs, Nd, Ho, Yb, Re, Tl, Pb céltárgyakon, deutronnyalábokkal Mn, Co, Mo, Rh, Nd, Ho, Yb, Au, Re, Pb céltárgyakon, alfa-részekkel  $^{114}\text{Cd}$ ,  $^{116}\text{Cd}$ , Cd céltárgyakon előidézett reakciók gerjesztési függvényét mérték és számították ki elméletileg. [9 (4) fő, 22 (2) M Ft]

Gépalkatrészek nukleáris kopásvizsgálatának terén folytatták a módszerek továbbfejlesztését, valamint a német és osztrák együttműködő partnerek által küldött minták vizsgálatát. [4 (3) fő, 20 (10) M Ft]

Folytatták a kiterjedt bizmutos közegekbeli neutrontranszport tanulmányozását. Az újabb mérések egyik célja a mérési tartomány 18 MeV neutronenergiáig való kiterjesztése volt. A vizsgálatok jelentőségét az adja, hogy a bizmut az egyik alkotóeleme annak a Pb-Bi eutektikus ötvözetnek, amelyet a nukleáris energetika több területén is alkalmaznak. [6 (1) fő, 3 (0) M Ft]

### *Atomfizika*

Megvizsgálták azt az atomi ütközési folyamatot, amelyben két elektron egyidejű kibocsátása megy végbe, és mindkét elektron a gerjesztő ionnal azonos irányban és közelítőleg azonos sebességgel repül ki az ütközésből. A méréseket az intézet VdG1 gyorsítóján a közelmúltban megépült repülési-idő-elektron-spektrométerrel végezték. Az eredmények egyértelműen igazolták a kételektronos lándzsahegycsúcs (cusp) létezését. A két elektron energiaértékei között megfigyelt erős korreláció a lövedék sebességével megegyező tömegközépponti sebességű kvázistacionárius kételektron-kontinuumállapot kialakulását valószínűsíti. [2 (2) fő, 15 (0) M Ft]

A Lundban végzett korábbi kísérletek során különböző atomi héjakon keltett fotoelektronok hatáskeresztmetszeteiben meglepő bal-jobb aszimmetriát figyeltek meg. Az aszimmetria paraméterének fotonforrástól való függésének vizsgálata céljából most a hamburgi HASYLAB DORIS-III tárológyűrű BW3-as nyalábcsatornáján is végeztek méréseket. (A két nyalábcsatorna paraméterei nagyjából megegyeznek.) Azt találták, hogy a kísérletileg meghatározott aszimmetriaparaméterek jól egyeznek a korábbiakkal. [8 (4) fő, 25 (0) M Ft]

A különböző szimmetriájú víz-, metán- és benzolmolekulák elektronhéjaiban a többszörös lyukkeltésnek és a molekula széttörésének a lyukkeltést követő folyamatát vizsgálták. A kísérletek egy részére a franciaországi Caenban, a másik részére Debrecenben a VdG-5 gyorsítón került sor. A tapasztalt anizotrópiát direkt ütközési folyamatokkal sikerült értelmezni, néhány fragmentációs csatornában viszont elméletileg egyelőre még nem értelmezett, finomabb effektusokat is találtak. [6 (2) fő, 7,4 (0,4) M Ft]

Megmutatták, hogy a héliumatom kétszeres ionizációja – ellentétben a korábbi eredményekkel – nem értelmezhető a függetlenrészezske-modell keretében. Az elektron-korreláció tényleges figyelembevétele még a teljes hatáskeresztmetszetek értelmezésekor sem mellőzhető. Az ún. kinematikailag teljes mérési eredmények interpretációja során is komoly pontatlanságot eredményez a hengersizmetria torzulása. Erre az Au<sup>53+</sup>-He ütközés vizsgálata során jöttek rá, amikor a lövedékion impulzusátadását és a kilöködött elektron energiáját együtt mérték. [4 (1) fő, 8 (0) M Ft]

Magyar–görög együttműködésben elemezték a metastabil 1s2s <sup>3</sup>S kezdeti állapotú lítiumszerű fluorionok héliumatomokkal és hidrogénmolekulákkal való ütközéseit a 0,3-3 MeV/amu ionenergia-tartományban. Folytonosan torzított hullámú kvantummechanikai (CDW) és klasszikus pályás Monte-Carlo-számolásokkal megmutatták, hogy a domináns folyamat ebben az ütközésben az elektronbefogás az ion n=2-8 főkvantumszámú héjaira. Megmutatták továbbá, hogy ha a befogásban kvartettállapot jön létre, akkor az foton(ok) kibocsátásával viszonylag gyorsan legerjesztődik az 1s2s2p <sup>4</sup>P „metastabil alapállapotba”. Így az ezen állapot bomlását jelző Auger-vonal relatív intenzitása az elektronspektrumban igen nagy lehet. Ezzel sikerült értelmezni egy kísérletileg tapasztalt anomáliát. [4 (3) fő, 6,1 (0,1) M Ft]

Részt vettek egy új típusú ECR-berendezés prototípusának megtervezésében a Bio-Nano Electronics Research Center (Toyo University, Japán) számára. A berendezéssel vas-fullerén keverékplazmákat és a vas és fullerén szintézise révén új anyagokat fognak előállítani a következő években. [5 (1) fő, 2,5 (0,5) M Ft]

Az ATOMKI elektron-ciklotronrezonanciás (ECR) ionforrásának továbbfejlesztése során sikerült a korábbinál jóval nagyobb intenzitású He-szerű argonnyalábot kapni (Ar<sup>16+</sup>), továbbá a maximális kivonó-gyorsító feszültség 30 kV-ra emelésével az eddigieknél 30%-kal magasabb energiájú ionnyalábok is elérhetővé váltak. [3 (3) fő, 10,5 (0,5) M Ft]

Monokromatikus szinkrotronsugárzással keltett Auger-spektrumok méréséből meghatározták a Ni KLM Auger-átmeneteinek energiáit és az Auger-vonalak relatív intenzitásait. A kísérleti eredmények a relativisztikus atomi számítások és a közbelső impulzusmomentum-csatolási modell érvényét igazolják. [5 (3) fő, 2,5 (0,5) M Ft]

A Ge 2s fotoelektron-spektrumainak analízisével kimutatták, hogy a visszaszórt elektronok spektrumaiból származtatott elektron-energiavesztési valószínűségi eloszlások alkalmazása a fotoelektron-spektrumok realisztikusabb leírását eredményezi, mint az optikai adatokból származtatható hasonló eloszlások alkalmazása. [7 (5) fő, 5,5 (0,5) M Ft]

Polimerek felületéről visszaszórt elektronok spektrumait nagy energiafelbontással mérték, és a spektrumokat Monte-Carlo-módszerrel szimulálták. A felületi réteg atomi összetételét röntgen-fotoelektron-spektroszkópiai módszerrel, a tömbi sűrűséget hélium-piknometriával, a felületi morfológiát és érdességet atomerő-mikroszkópiával határozták meg. Megállapították, hogy a spektrumokban a rugalmas elektronszórás következtében megjelenő csúcs intenzitása a felület morfológiájától (érdesség és porozitás) erősebben függ, mint a felületi gerjesztések és a hidrogénatomok visszalökődésének a hatásától. Ez az eredmény fontos a rugalmascsúcs-elektron-spektroszkópiának (EPES) a polimerek felületanalízisére történő alkalmazhatósága szempontjából. [9 (4) fő, 3 (0) M Ft]

Al- és Si-mintákban a felület közelében fotoelektronokat és Auger-elektronokat keltettek. Megvizsgálták az ezen folyamatokban szerepet játszó különböző típusú (vakancia- és elektrontranszport-indukált) plazmongerjesztések járulékait. Megmutatták, hogy a felületközeli elektronemisszió esetén az interferenciajelenségek valószínűsége megnő, és a különböző gerjesztési folyamatok hatása nem választható szét. [2 (1) fő, 1,3 (0,3) M Ft]

Monte-Carlo-módszerrel kiszámították a kétkomponensű félvégtelen polietilén mintáról rugalmasan visszaszórt elektronok hozamát és energiaeloszlását. A teljes hozamon és spektrumon kívül meghatározták külön az egyszeres, az egyatomos és a vegyes szórások hozamát és spektrumait. Megmutatták, hogy figyelembe kell venni a vegyes szórások hatását is. [3 (3) fő, 3 (0) M Ft]

Meghatározták 50 és 100 keV energiájú antiproton és héliumatom ütközésének teljes, egyszeresen és kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszeteit. A számításokat a klasszikus pályájú Monte-Carlo-módszer, valamint a kvantummechanikai folytonos torzított hullámú modell segítségével végezték el. A két modellel kapott teljes ionizációs hatáskeresztmetszetek igen jó egyezést mutatnak egymással. A klasszikus modell esetén jóval nagyobb az az energia- és szögterület, ahol a lövedék irányában nem detektáltak elektronokat, azaz az úgynevezett „anticusp” képződése jóval erősebb a klasszikus, mint a kvantummechanikai közelítés szerint. [1 (1) fő, 3 (0) M Ft]

#### *Szilárdtest- és felületfizika, anyagtudomány és statisztikus fizika*

A főleg szuperionikus kristályokból előállított nanoporokra irányuló kutatás eredményeként  $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ ,  $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ ,  $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Cl}$ ,  $\text{SbSi}$  és  $(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x})_2\text{Se}_3$  anyagokból állítottak elő különböző szemcseméretű nanokristályos porokat. A fizikai paraméterek vizsgálata és az eredmények kiértékelése folyamatban van. [5 (1) fő, 2 (0) M Ft]

Ionporlasztásos röntgen-fotoelektron-spektroszkópiai (XPS) módszerrel adatokat nyertek modell körülmények között kezelt atomerőművi szerkezeti elem felületi passzív rétegének kémiai összetételéről és egyes felületi szennyezők kémiai állapotáról. Az adatok a felületszennyezési és korróziós folyamatok azonosítására adnak lehetőséget. Az eredmények hasznosításában közvetlenül érdekelve van a Paksi Atomerőmű Rt. [6 (6) fő, 2 (0) M Ft]

Vékonyréteg-napelem abszorbens rétegében az alkotók kémiai állapotát és mélységi koncentrációeloszlását tanulmányozták ionporlasztásos röntgen-fotoelektron-spektroszkópiai (XPS) és szekunder atomos tömegspektroszkópiai (SNMS) módszerrel. A kapott információ a napelem működése szempontjából optimális rétegszerkezet kialakításához szükséges. Az eredmények hasznosításában érdekelte a KPE Kraft Project Elektronika Kft. [6 (4) fő, 11 (1) M Ft]

Mágneses és elektromos transzport mérésével megállapították, hogy a LaSrCoO perovszkitvegyületek milyen mértékű Sr-tartalom mellett mutatják a kolosszális mágneses ellenállás tulajdonságát. [3 (3) fő, 20,5 (0,5) M Ft]

A renormálásicsoport-módszer segítségével feltérképezték a mágnesesen csatolt réteges szupravezetők örvényszerkezetének leírására általuk megkonstruált réteges sine-Gordon-modell fázisszerkezetét. Modellükben meghatározták a fázisátalakulási hőmérséklet rétegszámfüggését, s ennek kísérleti ellenőrzése folyamatban van. Megmutatták továbbá, hogy a modell nemcsak a szilárdtestfizikában használható, hanem a kvarkbezárás jelenségének egyszerűsített modellezésére is. [3 (1) fő, 10 (0) M Ft]

#### *Detektálási és jelfeldolgozási technika*

A CsI(Tl) kristályokból és a Si pin-fotodiódákból felépülő magfizikai detektorrendszerek fejlesztése során szerzett detektálástechnikai tapasztalatot most a DEOEC Élettani Intézetében keletkező esetleg radioaktív szennyvíz monitorozására szolgáló mérőrendszerben alkalmazták. E mérőrendszer megépítése során kifejlesztettek egy intelligens ún. PowerOverEthernet hálózati technológiára alapozott elektronikai rendszert, amely tíz radiokémiai laboratórium folyamatos szennyvíz-kibocsátását felügyeli, az eseményeket naplózza, és szükség esetén riasztja mind az ott dolgozókat, mind a felügyeleti hatóságot. [7 (5) fő, 15 (0) M Ft]

Elemezték a 430 keV és 2 MeV energiájú protonoknak a félvezetődióda-detektorok teljesítőképességére gyakorolt káros hatásait. Félempirikus formulákat vezettek le a töltés begyűjtésének (a csúcs helyzete a spektrumban) és a töltésbegyűjtés szórásának (a csúcs szélessége) a besugárzási dózistól és az alkalmazott diódafeszültségtől való függésére. A formulák a kísérleti adatokat jól közelítik. [6 (3) fő, 2,7 (0,2) M Ft]

Eljárást dolgoztak ki PET-berendezésekben detektorként alkalmazandó szcintillációs kristályok minőségének jellemzésére. Ennek keretében elemzik a kristály elemösszetételét, gamma-sugárzás-gyengítési együtthatóját, a szcintilláció során keltett fény mennyiségét, statisztikus ingadozását és a fénykibocsátás időbeli lefolyását. A fejlesztési eredmények gyártásban való hasznosítását (kisállat- és humán-PET berendezések) a Mediso Kft. (Budapest) fogja előkészíteni. [1 (1) fő, 8 (1) M Ft]

Sikeresen befejezték a mini-PET II hálózati technológiára alapozott helyzetérzékeny detektorának hardver- és szoftverfejlesztését. [9 (6) fő, 56 (16) M Ft]

Befejezték a humámdiagnosztikai célra szolgáló multimodalitású TOF-PET/CT rendszertech-nikai elemzését. [9 (7) fő, 39 (9) M Ft]

A szcintillációs detektorokban a fénybegyűjtés tökéletlenségének a spektrumok minőségében megmutatkozó hatását vizsgálva megállapították, hogy a relatív fényhozamok a fénybegyűjtés hatásfokától és az energiától függően kis mértékben változnak (erre pontos energiakalibráció esetén figyelemmel kell lenni), továbbá hogy a tökéletlen fotontranszfer csúcskiszélesedést okoz. Bizonyították, hogy ez részben a fénybegyűjtés szórásának, másrészt a fénybegyűjtés térbeli inhomogenitásának az eredménye. [1 (1) fő, 1 (0) M Ft]

Befejezték a dozimetriai célra kifejlesztett CVD detektorok neutronbesugárzását, amellyel teljesítették az FP6\_COOP\_EU pályázatban vállalt feladatukat. [3 (3) fő, 8,8 (3,8) M Ft]



### *Ionnyaláb-analitika*

A léghő aeroszolok kutatása területén mintavételi kampányokat folytattak az aeroszol koncentráció gyors időbeli változásának nyomon követésére, valamint az aeroszol méreteloszlásának részletesebb meghatározására a fűtési időszak kezdetén és végén. Feltérképezték a városi aeroszol forrásait, rendkívüli emissziós eseményeket figyeltek meg, és becslést adtak az embert érő aeroszolterhelésre. [5 (4) fő, 32,8 (2,8) M Ft]

Meghatározták a lényeges mikro- és nyomelemek eloszlását nehézfémekkel szennyezett területeken élő vízínövények gyökerében. A hagyományos analitikai technikák kiegészítéseként használt ionmikroszkópia jelentősen hozzájárulhat a növények nehézfém-felvételének, -toleranciájának, -akkumulációjának megismeréséhez. [4 (2) fő, 4 (0) M Ft]

„A Tisza és a Felső-Tisza-vidék hidroökológiája” NKFP projekt folytatásaként kontrollált kísérletben határozták meg halak rézfelvételét. [6 (2) fő, 4 (0) M Ft]

Bronzkori leletanyagok jellemzésére komplementer analitikai (elektronsugaras, ionsugaras és röntgenemissziós) módszereken alapuló eljárást dolgoztak ki. Az eljárás alkalmazásának célja a magyarországi késő bronzkori leletanyagokhoz tartozó érclélőhelyek, fémkereskedelmi útvonalak felderítése, műhelykörök azonosítása. [2 (1) fő, 3 (0) M Ft]

Si pin-fotodiódák helyzetérzékeny detektorként való alkalmazásához végeztek nagy laterális feloldású ionnyalábbal besugárzásokat és roncsolásokat. Meghatározták az összefüggést a detektor jelmagasságának csökkenése és a létrehozott roncsolás, vagyis a vakanciák száma között, és kiszámították az adott típusú és energiájú ionra jellemző roncsolási faktort. [6 (4) fő, 12,8 (0,8) M Ft]

Polikristályos CVD gyémánt és szintetikus előállított egykristályos gyémántdetektorok töltéstranszport-vizsgálatainak összehasonlításával megállapították, hogy a kristályok határfelületén töltérekombináció történik, ezért az egykristályos gyémántdetektor spektroszkópiai tulajdonságai a CVD gyémántdetektoréhoz képest lényegesen jobbak. [7 (1) fő, 1 (0) M Ft]

Protonnyalábos mikromegmunkálással 10  $\mu\text{m}$  átmérőjű pórusokat tartalmazó szűrőlemezt készítettek 50  $\mu\text{m}$  vastag PMMA fóliákra. A kész lemezek minőségét optikai és elektronmikroszkóppal ellenőrizték. Megállapították, hogy a pórusok a vártak megfelelően kör alakúak, és a hibahelyek száma minden minta esetében kisebb, mint 2%. A szűrők áteresztőképessége (lyukterület/összterület) 20%. Jelenleg a DEOEC III. Belgyógyászati Klinika Regionális Immunológiai Laboratóriumában ígéretes kísérletek kezdődtek a biológiai alkalmazásukra. Lehetőség látszik egy védhető nemzetközi szabadalom kidolgozására és egy termék kifejlesztésére is. [5 (2) fő, 4,2 (0,2) M Ft]

### *Környezetanalitika és kormeghatározás*

Nemzetközi együttműködés keretében (MTA–RTA) végzett kutatások eredményeként összefoglaló munka készült a Keleti-Kárpátok szubvulkáni zónájának kronológiájáról. [6 (2) fő, 2,2 (0,2) M Ft]

Az Arisztotelész Egyetemen (Szaloniki) együttműködve geokronológiai vizsgálatokat végeztek Szithonia (Görögország) különböző típusú gránitos kőzetein, melynek alapján sikerült különböző magmás fázisokat elkülöníteni. [5 (2) fő, 3,2 (0,2) M Ft]

Befejeződött a Nyugati- és a Keleti-Kárpátok közötti átmeneti zóna hidrotermális rendszereinek geokronológiai összehasonlító vizsgálata. [4 (2) fő, 3,4 (0,4) M Ft]

K–Ar-os kormeghatározással sikerült elkülöníteniük a Papuk hegységben talált illit kistökű metamorfózisának fázisait. [5 (2) fő, 1 (0,5) M Ft]

A mátraderecskei szén-dioxid szárazfürdőben és környezetében végzett egyéves folyamatos helyszíni mérések elemzése alapján felismerték, hogy a medencében a gyógygáz nemkívánatos viselkedését elsősorban a medencefal időszakos hőmérsékletinverziója, valamint a kültéri szél zavaró hatásai okozzák. Hőszigetelési és légtechnikai beavatkozásokat hajtottak végre, amelynek eredményeképpen 2007 végére a medence alkalmassá vált a rendeltetésszerű használatra. Gazdasági hasznosulásban érdekelt vállalkozás: Mofetta Kft, Mátraderecske. [3 (1) fő, 5 (0) M Ft]

A talajgáz szén-dioxid-tartalmának és a talajfelszínen való fluxusának egy kb. 1 ha-s területen való feltérképezésével kijelölték egy szén-dioxidos szárazfürdő gyógygázellátását szolgáló gáznyerő hely optimális helyét. Hasznosulásban érdekelt: Erzsébet Park Hotel Kft., Parádfürdő. [2 (1) fő, 3 (0) M Ft]

#### *Radiokémia*

Nagy fajlagos aktivitású [<sup>11</sup>C]metil-Ro15-1788 (flumazenil) radiofarmakont állítottak elő desmetil-Flumazenil (Ro15-5528) N-metilezésével. A szintézis ideje a besugárzás befejezésétől számítva 32 perc volt, a bomláskorrigált hozam 75%, a radiokémiai tisztaság >98%, az elért specifikus aktivitás 12Ci/μmol.

Fe-módosított MCM-41 mezopórusos szilikátkatalizátor felületi és katalitikus tulajdonságait tanulmányozták metanol segítségével. A katalizátor reaktív felületét radioaktív <sup>11</sup>C-jelzett metanollal határozták meg, sugárzásdetektorok alkalmazásával. Az eredmények megerősítették az elméletileg feltételezett reakciómechanizmust. [3 (3) fő, 13,7 (1,7) M Ft]

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

#### *Hazai kutatási kapcsolatok*

Az intézet kutatómunkájának minden területén széleskörűek a hazai együttműködések. Ezek közül különösen jelentősek az alábbi intézményekkel való kapcsolatok:

- a részecske- és magfizika és alkalmazásai területén: az MTA RMKI, a Debreceni Egyetem (DE) Kísérleti Fizikai Tanszéke és Elméleti Fizikai Tanszéke, az MTA AEKI, a BME Nukleáris Technikai Intézete, a Szegedi TE, a DE Nukleáris Medicina Központja;
- az atomfizika és alkalmazásai területén: a DE Kísérleti Fizikai Tanszéke, Szilárdtestfizikai Tanszéke és Alkalmazott Kémiai Tanszéke, a BME Kísérleti Fizikai Tanszéke, a Miskolci Egyetem Fizikai Tanszéke, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, az MTA MFA;
- a kondenzált rendszerek fizikájának területén: az MTA MFA, az MTA SZFKI, az MTA RMKI, az MTA SZTE Lézerfizikai Kutatócsoportja, a DE Szilárdtestfizikai Tanszéke és Fizikai Kémia Tanszéke, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, az ELTE Magkémiai Intézete; a Kraft Projekt Rt., a Szegedi TE, a Paksi Atomerőmű Zrt.;
- a detektálási és jelfeldolgozási technika területén: a DE Nukleáris Medicina Központja, a Mediso Kft. (Budapest), a DE Kísérleti Fizikai Tanszéke;
- ionnyaláb-analitika területén: a DE több tanszéke és klinikája, az MTA MFA, az MTA SZFKI, az MTA RMKI, az MTA AEKI, az MTA Pannon Egyetemi Levegőkémiai

Kutatócsoportja, a Szegedi TE Régészeti Tanszéke, az Országos Környezet-egészségügyi Intézet, az Országos Meteorológiai Szolgálat, DEOEC Bőrgyógyászati Klinika;

- környezetanalitika és kormeghatározás 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 Zrt., a püspökszilágyi RHKT Kht., a Mecsekérc Zrt.;
- a régészeti kutatások területén: a Magyar Nemzeti Múzeum és a hazai múzeumi hálózat több más intézménye;
- radiokémia területén: a DE Nukleáris Medicina Központja.

#### *Részvétel a felsőoktatásban*

Az intézet 2007-ben megtartotta korábban is betöltött szerepét a felsőoktatásban, a Debreceni Egyetemen fenntartott hagyományos kapcsolatait. Az ATOMKI 15 kutatója a beszámolási időszakban meghirdetett 18 kurzus keretében 353 tantervi óra megtartásával járult hozzá a Debreceni Egyetemen (DE) folyó oktatáshoz. Egy kutató a Szegedi Tudományegyetemen tartott egy harminc órás kurzust. A gyakorlati órák száma 2007-ben 712 volt, amelyet 27 kutató részvételével tartottak. A pregraduális képzésben elsősorban fizikus, fizika tanári, informatikus, környezettan, környezettudományi, valamint környezetgazdálkodási agrármérnök szakos hallgatóknak oktattak (előadások, speciális laboratóriumi gyakorlatok, diplomamunkák). A beszámolási időszak folyamán 8 PhD-, 7 diplomamunkás és 4 TDK-hallgató dolgozott az intézetben, a témavezetésre fordított órák száma összesen 1080 volt.

A DE TTK kihelyezett 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.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

2007. október 8 és 12 között Japán-Magyar Tudományos Szemináriumra került sor Magyarországon három városában (Debrecen, Szeged, Budapest) „a fizika a modern tudományban és technológiában” tárgykörből. A szemináriumot a debreceni Atomki szervezte. Ugyancsak az ATOMKI szervezésében zajlott le 2007. április 2-án a „Magreakciók a nukleáris asztrofizikában” című minikonferencia.

A több intézményre kiterjedő nemzetközi programokban való részvétel, valamint az államközi és az MTA által kötött egyezményekre alapozott együttműködés (l. IV. fejezet) mellett az intézet nemzetközi kapcsolataiban lényeges szerepet tölt be az intézetközi megállapodásokon alapuló, valamint az alkalmi, informális együttműködés is. Ilyen együttműködések voltak:

- a magfizika és alkalmazásai körében 22 ország 49 kutatóhelyével;
- az atomfizika és alkalmazásai területén 15 ország 32 kutatóhelyével;
- a detektálási és jelfeldolgozási technika területén 4 ország 6 kutatóhelyével;
- ionnyaláb-analitika területén 4 ország 4 kutatóhelyével;
- környezetanalitika és kormeghatározás területén 13 ország 19 kutatóhelyével.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

Az ATOMKI kutatói 2007-ben 23 OTKA-, 2 NKTH-OTKA- és 3 NKFP-pályázat céljainak megvalósításában vettek részt.

Az intézet nemzetközi együttműködéseinek részben pályázati rendszerben szervezett kutatási programjai között 2 COST-program, 3 NAÜ-projektum és 2 CERN-projektum volt.

Államközi (TÉT) egyezményeken alapuló, pályázati rendszerben támogatott együttműködési kapcsolatok voltak 14 témában argentin, cseh, dél-afrikai, francia, horvát, román, szlovén, szlovák és ukrán kutatóhelyekkel.

A MTA által kötött egyezményeken alapuló kétoldalú együttműködési kapcsolatok 20 témában bolgár, cseh, egyesült államokbeli, finn, francia, holland, japán, lengyel, mexikói, német, román, spanyol, 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 együttműködés a főhatósági egyezmény nélkül teljes egészében meghiúsult volna.

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

1. Bastin, B, Grévy, S, Sohler, D, Sorlin, O, Dombrádi, Zs, Achouri, NL et al.(35), Elekes, Z: Collapse of the N=28 shell closure in 42Si. Physical Review Letters 99 (2): 2503 (2007)
2. Hunyadi M, van den Berg, AM, Davids, B, Harakeh, MN, de Huu, MA, Wörtche, HJ et al. (13), Csatlós M, Gulyás J, Krasznahorkay, A, Sohler, D: Evidence for direct neutron decay of the isoscalar giant dipole resonances in 90Zr, 116Sn, and 208Pb. Physical Review C Nuclear Physics 75 (1): 4606
3. Tumino, A, Spitaleri, C, Mukhamedzhanov, A, Rapisarda, GG, Cherubini, S, Crucilla, V et al. (18), Elekes, Z, Fülöp, Zs, Gyürky, Gy, Kiss, GG, Somorjai, E: Suppression of the Coulomb Interaction in the Off-Energy-Shell p + p Scattering from the p + d → p + p + n Reaction, Physical Review Letters 98 (2007) 252502-1 – 252502-4
4. Gyürky, Gy, Confortola, F, Costantini, H, Formicola, A, Bemmerer, D, Bonetti, R et al. (30), Elekes, Z, Fülöp, Zs, Somorjai, E:  ${}^3\text{He}(\alpha, \gamma){}^7\text{Be}$  cross section at low energies. Physical Review C 75 (2007) 035805-1 - 035805-8
5. Kiss GG, Gyürky Gy, Elekes Z, Fülöp Zs, Somorjai E, Rauscher T et al. (7):  ${}^{70}\text{Ge}(p, \gamma){}^{71}\text{As}$  and  ${}^{76}\text{Ge}(p, n){}^{76}\text{As}$  cross sections for the astrophysical p process: Sensitivity of the optical proton potential at low energies. Physical Review C 76 (2007) 055807-1 - 055807-9
6. Elekes Z, Dombrádi Zs, Aoi, N, Bishop, S, Fülöp Zs, Gibelin, J et al. (37), Kalinka G, Sohler, D: Spectroscopic study of neutron shell closures via nucleon transfer in the near-dripline nucleus 23O. Physical Review Letters 98 (2007) 102502-1 - 102502-4
7. Kruppa, AT, Suzuki, R, Kato, K: Scattering amplitude without an explicit enforcement of boundary conditions. Physical Review C 75 044602 (2007)
8. Lévai G, Cseh J, Van Isacker, P: Application of cluster supersymmetry to nuclei with mass numbers A=20,19 and 18. Journal of Physics G 34: 1729–56 (2007)

9. Vértesi T: Genuine tripartite entanglement in the non-interacting Fermi gas. *Phys. Rev. A* 75 042330, 1–8 (2007)
10. Tárkányi F, Hermanne, A, Ditrói F, Takács S, Király B, Baba M. et al. (9): Production of longer lived radionuclides in deuteron induced reactions on niobium. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 255: 297 (2007)
11. Sarkadi-Priboczki E, Kumar, N, Salmi, T, Murzin, DYu, Kovacs Z: Radioisotope tracer study of co-reactions of methanol with ethanol using <sup>11</sup>C-labelled methanol over alumina, H-ZSM-5 and Cu-ZSM-5. *Topics in Catalysis* 45: 169 (2007) If. 2.321
12. Ricz S, Ricsóka T, Kövér Á, Varga D, Huttula M, Urpelainen, S et al. (8): Experimental observation of left–right asymmetry in outer s-shell photoionization. *New Journal of Physics* 9: 274–282 (2007)
13. Sulik, B, Tökési K, Stolterfoht, N, Ricsóka, T, Víkor, Gy, Nagy Sz et al. (10), Berényi Z, Berényi D: Fermi-shuttle processes in the emission by ion impact: Contribution to radiation damages. *Radiation Physics and Chemistry* 76: 483–486 (2007)
14. Kövér L, Drube, W, Berényi Z, Cserny I, Medicherla, VV, Ishii, T et al. (8): KLL Auger Resonant Raman transition in metallic Cu and Ni. *Surface Science* 601: 1085 (2007)
15. Novák M, Egri S, Kövér L, Cserny I, Drube, W, Werner, WSM: Energy dependence of electron energy loss processes in Ge 2s photoemission. *Surface Science* 601: 2344 (2007)
16. Nándori I, Jentschura, UD, Nagy S, Sailer, K, Vad K, Mészáros S: On the applicability of the layered sine-Gordon model for Josephson-coupled high-Tc layered superconductors. *Journal of Physics: Condensed Matter* 19: 23 (2007)
17. Németh Z, Homonnay Z, Árva F, Klencsár Z, Kuzmann E, Vértes A et al. (14), Hakl J, Mészáros S, Vad K: Response of La<sub>0.8</sub>Sr<sub>0.2</sub>CoO<sub>3</sub>-beta to perturbations on the CoO<sub>3</sub> sublattice. *European Physical Journal B* 57: 257 (2007)
18. Kis SA, Emri M, Opposits G, Bükki T, Valastyán I, Hegyesi Gy et al. (14), Imrek J, Kalinka G, Molnár J, Novák D: Comparison of Monte Carlo simulated and measured performance parameters of miniPET scanner. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 571: 449–452 (2007)
19. Simon A, Kalinka G, Jakšić, M, Pastuović, Ž, Novák M, Kiss ÁZ: Investigation of radiation damage in a Si PIN photodiode for particle detection. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 260: 304–308 (2007)
20. Rajta I, Chatzichristidi, M, Baradács E, Cserhádi Cs, Raptis, I, Manoli, K et al. (7): Proton beam micromachined buried microchannels in negative tone resist materials. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 260: 414–418 (2007)
21. Kertész Zs, Szikszai Z, Pelicon, P, Simčič, J, Telek A, Bíró T: Ion beam microanalysis of human hair follicles. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 260: 218–221 (2007)
22. Molnár M, Bujtás T, Svingor É, Futó I, Svetlik, I: Monitoring of atmospheric excess <sup>14</sup>C around Paks Nuclear Power Plant, Hungary. *Radiocarbon* 49: 1031–1043 (2007)

23. Szántó Zs, Svingor É, Futó I, Palcsu L, Molnár M, Rinyu L: A hydrochemical and isotopic case study around a near surface radioactive waste disposal. *Radiochimica Acta* 95: 55–65 (2007)
24. Szántó Zs, Kertész R, Morgós A, Nagy D, Molnár M, Grabner M et al. (14), Rinyu L, Futó, I: Combined techniques to date the first Turkish bridge over the Tisza river, Hungary. *Radiocarbon* 49: 515–526 (2007)
25. Wijbrans, J, Németh K, Martin U, Balogh K:  $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$  geochronology of Neogene phreatomagmatic volcanism in the western Pannonian Basin, Hungary. *J. Volcanology and Geothermal Res.*, 164: 193–204 (2007)
26. Pécskay Z, Haller MJ, Németh K: Preliminary K/Ar geochronology of the Crater Basalt Volcanic Field (CBVF), Northern Patagonia, Argentina. *Revista de la Asociación Geológica Argentina* 62: 255 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Atommagkutató Intézet

Átlagléttség <sup>1</sup> :	197	Ebből kutató <sup>2</sup> :	97
PhD, kandidátus:	68	MTA doktora:	12
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	3
		rendes tag:	3
			15
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			283
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			264
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	172
nemzetközi együttműködés keretében:	216	SCI által regisztrált folyóiratban:	172
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	322,5	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	893
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			893
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	1	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	6	MTA doktora:	2
		levelező tag:	1
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	106	posztterek száma:	66
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	30	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			37
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	33	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	19	Gyakorlati kurzusok száma:	23
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	8
			1095
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			878,1 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	11	Teljes saját bevétel:	358,4 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			25
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	45,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			18
NKFP:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	40 MFt
Egyéb:	15	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			14
EU forrásból:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	23,8 MFt
Egyéb:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	25,5 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			14
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7,7 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## FÖLDRAJZTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

1112 Budapest, Budaörsi út 43–45.

Telefon: 309–2600, Fax: 309–2690

e-mail: schweift@mtafki.hu, honlap: www.mtafki.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

2007-ben az intézet, mint a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának tagja végezte tudományos tevékenységét. A kutatóhely kiemelt tudományos feladatai közé tartoztak az ország természeti környezetének rövid és hosszú távon várható változási folyamataihoz, továbbá a társadalmi térszerkezet átalakulásához kapcsolódó vizsgálatok. Ezek egyaránt kapcsolódtak nemzetközi pályázatok során a tárgyévben (TRACE, PROMINSTAT, SeFoNe), ill. korábban elnyert kutatási projektekhez (EU-LIFE SOWAP, EU-6 BORASSUS, INTERREG III/B – URGE, ACRE, COST stb.), valamint a hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez (OTKA, OND, OFA stb.). Kiemelt feladat volt a magyar–ukrán tudományos együttműködés keretében történő „Ukraine in Maps” c. tematikus kiadvány elkészítése.

Az intézet természetföldrajzi kutatásainak fő feladatait 2007-ben az alábbi kutatási programok önálló, ill. együttműködésben való művelése jelentette: Az EU-FP-6 INCO – BORASSUS projekt keretében a „Geotextíliák talajerózióra gyakorolt hatásának vizsgálata szőlőben és gyümölcsösben” c. projekt; a Syngenta (UK) támogatásával folyó „A környezetkímélő mezőgazdaságnak a talajok nyomelem háztartására gyakorolt hatásainak vizsgálata” c. projekt; „A lineáris erózió domborzatformáló és környezetalakító szerepe Magyarországon” c. MTA FKI–FVM–ELTE közös projekt; A SOWAP keretében folyó, EU-LIFE által is támogatott „Talaj- és felszíni vízvédő minimum talajművelés alkalmazásával Észak- és Közép-Európában” c. projekt; valamint a COST keretében folyó „A magyarországi vulkáni talajok klasszifikációja a nemzetközi WRB rendszerben” c. projekt.

A MEH NTH és az MTA koordinációjában folyó VAHAVA projekt időarányos kutatási feladatai során vizsgálták a várható klímaváltozás tájfeldrajzi és felszínfejlődési következményeit, valamint a talajerózióra gyakorolt hatásait.

A Zágrábi Egyetemmel való együttműködés keretében folytatták az Észak-Adriai térség geomorfológiai fejlődéstörténetének kutatását. Ezen belül kiemelt figyelem fordult a térség őskörnyezetének és őség-hajlatának vizsgálatára, a pliocén és pleisztocén domborzatfejlődés és üledékképződés törvényszerűségeinek feltárására hazai és Isztriai-félszigeti mintaterületeken.

2007-ben is átfogó kutatások folytak a nukleáris energiatermelés során keletkező kis és közepes radioaktivitású hulladékok lerakására és biztonságos elhelyezésére alkalmas területeken. Ehhez kapcsolódóan széleskörű lejtőállékonysági, szedimentológiai, talajeróziós vizsgálatokra került sor a Bodai Aleurit, továbbá Püspökszilágy és Bábaapáti települések környezetében.

Az alapkutatások keretében 2007-ben is a kiemelt feladatok között szerepelt a tárgyévben futó 10, és egy induló új OTKA téma művelése (Mediterrán löszök szedimentációs vizsgálata);



Magyarország kistájkatasztere; Magyarország etnikai földrajza és recens etnikai folyamatok a szomszédos országokban; A Kisalföld etnikai térszerkezete; Dél-Dunántúl németiségének etnikai földrajza; Egészségturizmus és életminőség Magyarországon; Idegenforgalmi térszerkezet a Tápíóvidéken; A mobilkommunikációs szolgáltatások fejlődésének földrajzi sajátosságai Magyarországon; A modern magyar ipar térszerkezeti összefüggései; valamint új témaként A városrehabilitációs programok hatása a nagyvárosi népesség lakásmobilitására). Közülük 5 egy éves halasztás után záródott 2007-ben.

2007-ben folytatódott az EU-5 keretprogramhoz kapcsolódó, a városi zöldterületek rehabilitációját szolgáló URGE projekt (INTERREG III/B), továbbá az EU-6 keretében „A kreatív tudásszint növelésének szerepe az európai nagyvárosi régiók versenyképességének javításában” c. ACRE projekt (Amszterdami Egyetemen közös kutatás). Új projektként indult az EU-6 keretprogram 7. prioritásába tartozó SeFoNe (Searching for neighbours: dynamics of physical and mental borders in the New Europe” címmel), valamint DFG-MTA közös finanszírozással a „Revitalisierung von gründerzeitlichen Altbauwohnquartieren in Budapest – Prozesse, Strategien, Perspektiven” c. projekt.

Befejeződött a Magyarország Kistájkataszterének átdolgozását és bővítését célzó OTKA kutatás. A 2004-ben megindított, széleskörű természet- és társadalomföldrajzi szakmai együttműködésben (OMSZ, TAKI, SZTE) folyó munka során 2007 végére valamennyi kistáj feldolgozása megtörtént. Az emberi tevékenység és a szélsőséges hidogeográfiai jelenségek (árvizek) felszínfejlődési következményeinek vizsgálata a Tisza-völgy árvíz által veszélyeztetett süllyedék-területeire vonatkozó kutatási program keretében folytatódott, különös tekintettel Tisza melléki és a Körös-menti területek hullámtéri feliszapolódásával kapcsolatos jelenségek értékelő elemzésére.

Kiemelt feladat volt a tárgyévben az MTA elnökségének megbízására UNTA GII–MTA FKI együttműködésben végzett „Ukraine in Maps” c. angol nyelvű atlaszmű elkészítése (megjelent 2008 elején).

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

A BORASSUS projekt keretében szőlőterületeken és gyümölcsösökben elvégzett vizsgálataikkal kimutatták, hogy a különböző növényi alapú geotextiliák (juta, Borassus, buriti) közül a csapadékvíz beszivárgását a talajba alacsony intenzitású csapadékok mellett a legnagyobb mennyiségben a juta alkalmazása segíti elő. A geotextilek közül viszont a buriti vette fel a legnagyobb mennyiségben a csapadékvizet, de az (a BORASSUS-hoz hasonlatosan) legnagyobbbrészt a légkörbe – az evaporáció útján – közvetlenül visszakerült. A juta a buritihez hasonló mennyiségű vizet vett fel, de annak legnagyobb részét a talaj felé továbbította.

Kutatásban résztvevők száma: 16 fő, ebből intézeti: 6 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 12 M Ft, ebből pályázati forrás: 12 M Ft

*Eredmény hasznosíthatósága:* A talajkímélő művelési módok a szőlők és a gyümölcsösök területén is hatékonyan segíti a talajvédelmet.

A TRACE projekt keretében folyó kutatásaikkal bebizonyították, hogy a kémelő talajhasználat a feltalaj ásványos karakterisztikájának megváltozását eredményezi. A kémelő művelés (M) mellett a talajok kvarctartalma csökken, kaolinit tartalma pedig kimutathatatlan. Az eltérő művelési módok három év alatt elmozdulást eredményeztek abban az összefüggésben is, hogy az alumínium aránya enyhén emelkedik a vassal szemben. A különbség a lehordott üledékekben is megfigyelhető. Az így tapasztalt különbségek az egyes művelési módoknál jóval jelentősebbek. Ugyancsak kimutatták, hogy a nyomelemek szorpciójáért elsősorban a vas ásványok felelősek, az alumínium szerepe ebben a tekintetben alárendelt, vagyis leginkább az ólommal mutat korrelációt. Ezen túl a különböző nyomelemek szorpciójában a szerves anyagok a szakirodalomban feltüntetett értékeknél sokkal csekélyebb szerepet játszanak.

Kutatásban résztvevők száma: 14 fő, ebből intézeti: 5 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 10 M Ft

*Eredmények hasznosíthatósága:* A környezetkímélő mezőgazdálkodási gyakorlat tudományos megalapozását szolgálja, a talajok hosszú távú megővásával biztosítva a tápanyag megőrzését.

A COST keretében végzett vulkáni talaj-osztályozási vizsgálataikkal kimutatták, hogy az Andosolok elsősorban friss vulkáni hamun kialakult talajnak minősíthetők, ahol az andic horizont meglétének egyik legfontosabb paramétere az allofán-tartalom. Bebizonyították, hogy a magyarországi erubáz talajok nem sorolhatók be a WRB Andosol osztályába, és a legtöbb típusos erubáznak tekinthető szelvény a Phaeozemek csoportjába tartozik. A közzethatású, vulkáni talaj a diagnosztikai határértékek alapján az Andosolok közül kiszorult, ám besorolásuk a sztyeppterületek ásványi talajai között (Phaeozems) sem kielégítő.

Kutatásban résztvevők száma: 5 fő, ebből intézeti: 3 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 4 M Ft, ebből pályázati forrás: 3 M Ft

*Eredmény hasznosíthatósága:* A genetikai és talajföldrajzi, valamint a diagnosztikai szemléleten alapuló (WRB) talajosztályozási rendszer összehangolása elősegíti a hatékonyabb földhasznosítás talajtani megalapozását.

Az INTERREG III/B - URGE (GreenKeys) projekt keretében folyó társadalomföldrajzi kutatások során átdolgozták és a projekt céljaira adaptálták a korábbi URGE projektben kidolgozott, a nagyvárosi integrált zöldterület fejlesztéseket megalapozó interdiszciplináris kritériumrendszert (ICC). Ugyancsak kidolgozták a hozzákapcsolódó monitoring rendszert, amelyet a GreenKeys lengyelországi és budapesti munkaértekezletén sikerrel mutattak be. 2007 őszén elkezdték a projekt keretében megjelentetni kívánt kétnyelvű Green Book tanulmánykötet szervezését.

Kutatásban résztvevők száma: 4 fő, ebből intézeti: 3 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 5 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft

*Eredmény hasznosíthatósága:* Elősegíti az egyre fogyó és kritikus állapotban levő nagyvárosi zöldterületek rehabilitációját és területük növelését. A kutatási eredmény a felsőoktatásban (környezetvédelem, városföldrajzi tananyag) is jól hasznosítható.

A hazai ipar térszerkezetének átalakulását vizsgálva megállapították, hogy az ipari parkállomány sajátosságaiban, területi struktúrájában és típusaiban 2001 és 2007 között bekövetkezett fontosabb változások a relokációban nem játszanak nagy szerepet, ugyanakkor a régebben alapított, zöldmezős és érettebb fázisban levő ipari parkok az ipar területi szerkezetében determináló tényezők. Azt is bebizonyították, hogy a magyar iparban más

ágazatokhoz viszonyítva a relokáció mértéke jóval szerényebb méreteket öltött, mint ahogy a médiahíradások alapján feltételezhető volt.

Kutatásban résztvevők száma: 2 fő, ebből intézeti: 1 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 1,5 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,5 M Ft

*Eredmény hasznosíthatósága:* Hozzájárul a hazai iparfejlődés térszerkezeti anomáliáinak csökkentéséhez, egyben elősegítheti egy átgondoltabb hazai ipari relokációs politika kialakítását.

A magyarországi mobilkommunikációs szolgáltatások térszerkezeti sajátosságait vizsgálva bizonyították, hogy, a mobiltelefonok birtoklásának, térbeli terjedésének és különféle szolgáltatások igénybevételének mértéke főként a népesség korösszetételének, gazdasági és társadalmi státusának, iskolázottságának, jövedelmi viszonyainak és lakóhelyének függvényeként alakul. Kimutatták, hogy a távközlési innovációk nagyvárosi megjelenése az átlagosnál kedvezőbb műszaki-gazdasági és társadalmi feltételekből fakadó hatékonyabb hasznosíthatósága miatt állandósítja a perifériáknak a fejlettebb térségektől való lemaradását.

Kutatásban résztvevők száma: 2 fő, ebből intézeti: 1 fő

Becsült intézeti ráfordítás: 1,5 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,5 M Ft

*Eredmény hasznosíthatósága:* A mobilkommunikáció általánossá válásból eredő lehetőségek hatékonyabb felhasználása a hátrányos helyzetű régiók és települések gazdasági fejlődésének gyorsítására.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

A Kutatóintézet 2007-ben is széles körű együttműködést folytatott az MTA földtudományi intézeteivel, emellett az MTA egyéb rokontudományi intézetei közül a Regionális Kutatások Központjával, az Etnikai-nemzeti Kisebbségkutató Intézettel, a Történettudományi Intézettel, a TAKI-val, a Szociológiai Kutatóintézettel, valamint különféle szaktárcák kutatóhelyeivel (KVM, FM, OMSZ, KTI stb.).

Több országos horderejű kutatásban (pl. VAHAVA) vettek részt, amelyet a MEH Nemzeti Területfejlesztési Hivatala, továbbá különböző minisztériumok, (GM, KVM, OM, KüM), ill. más országos hatáskörű szervek (ÁNTSZ, HTMH, KSH), alapítványok indítottak, ill. koordináltak. Az egyes egyetemek földrajzi, ill. földtudományi tanszékeivel közösen művelt kutatási témacsoportok, témák száma megközelítette a 15-öt.

Tudományos kutatóik 2007-ben is szerteágazó felsőoktatási tevékenységet folytattak. Számos felsőoktatási intézményben végeztek oktatást félállású oktatóként, ill. óraadóként. A legszorosabb kapcsolata az intézet kutatóinak az egyetemekkel volt (ELTE, PTE, SZIE, SZTE, PTE, PPKE, NYME, ME, Budapesti Corvinus Egyetem, CEU, SZIE, VE), de a főiskolák (BBE, KJF, BGF, KVIF) geográfus, ill. terület- és településfejlesztő szakember képzésében is tevékenyen részt vettek. 2006-ban 11-en folytattak felsőoktatási tevékenységet munkatársaik közül, amelyek során a következő tantárgyakat oktatták:

A Kárpát-medence geomorfológiája  
Földrajzi modellezés a térinformatikában  
Tájföldrajz  
Tájökológia és tájvédelem

Globális környezeti változások  
A terület- és településfejlesztés alapjai  
Gazdaságföldrajz  
Geographie - Tourismusgeographie  
Magyarország térgazdaságtana  
Etnikai, vallási és politikai földrajz  
Általános népességföldrajz  
Településföldrajz  
Politikai földrajz  
A turizmus humánökológiája  
Bevásárlóturizmus  
Szociálgeográfia

2007-ben is aktív oktatási tevékenység folyt az ELTE-nek az intézethez kihelyezett Alkalmazott Földrajzi Tanszéki Csoportjában, amelynek több mint egy évtizede ad otthont az FKI. A beszámolási évben 8 kutatójuk kapcsolódott be a hazai geográfus hallgatók PhD képzésébe, ill. egyetemi diplomamunkák irányításába. 11 kutató véleményezett felsőoktatási és akadémiai pályázati munkákat, PhD-dolgozatokat, diplomamunkákat. 5 munkatársuk vezetett terepgyakorlatokat hazai és külföldi egyetemi hallgatói csoportok részére, 4 fiatal kutató (MTA álláshelyen) végzi az ELTE, ill. a PTE doktoriskoláját. Az intézet igazgatója a Szent István Akadémia rendes tagja. Tudományos tanácsadók közül egy a HUNGEO elnöke, egyet pedig 2007-ben az ESSC és ISCO nemzetközi szervezetek elnökévé választották.

A beszámolási évben 12 kutatójuk összesen 62 előadást tartott, ebből 33-at nemzetközi tudományos rendezvényeken. A hazai tudományos események közül kiemelkednek a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának februári akadémiai beszámoló ülésén, a X. Osztály májusi ülésén, az IAG pécsi konferenciáján, továbbá a novemberi Intézeti Tudományos Napon rendezett konferencián elhangzott előadások, illetve kiállított poszterek. Egy tudományos tanácsadójuk az MTA Földrajzi I. Tudományos Bizottságának alelnöki feladatait látja el.

Az intézet 2007-ben is kiemelt 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. Egy főmunkatársuk a szlovákiai Selye János Egyetemen is ellát felsőoktatási feladatokat.

A beszámolási év tudományos szakmai rendezvényei közül kiemelkedik az intézet által szervezett Ukrán–Magyar Földrajzi Szeminárium (FKI, Budapest, szept.), az IAG Geomorfológiai Konferenciája (Pécs, okt.) Ugyancsak az intézetben rendezték meg 2007-ban a Kretzoi Miklós születésének 100. évfordulójára szervezett tudományos konferenciát (FKI, Budapest, nov.).

A külföldi tudományos rendezvények közül az intézet kutatói a következőkön szerepeltek előadással, korreferátumokkal, ill. konzulensként: Strategics of Identity Construction Conference (Bloomington, USA), AAG Conference (San Francisco, USA), Conference on Desertification (Ulanbator, Mongólia), UNESCO International Seminar (Peking), EUGEO-2007 Conference (Amszterdam), BORASSUS Sustainable Development Konferenciáján

(Algarve, Portugália), a COST Soil and Hillslope Management Konferenciáján (Firenze) és éves munkaértekezletén (Prága), az ESSC 5. Kongresszusán (Palermo), Raumentwicklung und Planungskultur Konferencián (Bernried, Németország), „15 Jahre Euroregion Elbe“ konferencián (Drezda), Egy város – két ország: Komárom-Komárno Konferencián (Révkomárom), GreenKeys Szemináriumon (Sanok, Lengyelország), 3. ACRE Konferencián (Szófia) és Szimpóziumon (München), IGU Geography and Public Policy Conference (Bern, Svájc).

A Kárpát-medence magyarlakta területeinek térszerkezeti problémáival foglalkozó kutatóik Bécsben, Pozsonyban, Kolozsvárott, Aradon, Ljubljánában, Újvidéken, és Zágrábban vettek részt tanácskozásokon, workshopokon.

2007-ben az intézet nemzetközi kapcsolatai különösen szorosak voltak az Ukrán, a Horvát, a Román, valamint a Szlovák Tudományos Akadémiák földrajzi intézeteivel, a németországi Institut für Länderkunde-val, (Lipcse), a kijevi Sevcsenko Egyetemen, továbbá a zágrábi, a lipcsei, a kolozsvári, a tübingeni, a berni, berlini, a bergeni, és a komárnói egyetemekkel, valamint a Beregszászi Főiskolával. E kapcsolatok számos vonatkozásban kötődnek az említett nemzetközi együttműködésben folyó kutatásokhoz, ill. különböző fajta, kétoldalú tudományos együttműködésekhez. 2007-ben is bővültek az intézet nemzetközi kapcsolatai a rigai és a pármái egyetemekkel.

Munkatársaik 2007-ben is vendégül láttak külföldi kutatókat, akiknek magyarországi szakmai programját szervezték elsősorban Ukrajnából, Romániából, Szlovákiából, Svájcban, Ausztriából és a Kárpát-medence felsőoktatási intézményeiből (Újvidék, Szabadka, Beregszász, Nagyvárad, Kolozsvár, Zágráb).

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. Egy senior kutatójuk Bolyai Ösztöndíjat nyert el. Az intézet kutatóinak idegen nyelvű tanulmányai 6 külföldi szakfolyóiratban és számos konferencia kiadványban jelentek meg.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

2007-ben egy OTKA pályázatot (Egészségturizmus és életminőség Magyarországon) nyertek el. A korábban elnyert hazai pályázatok között jelentős arányban voltak jelen 2007-ben is az OTKA pályázatok (a művelt témák száma: 11), továbbá egy OFA projekt és egy OM pályázat.

Folytatták az EU-6-os keretprogram alá tartozó, 2006-ban indult ACRE pályázathoz (Kreatív tudásalapú gazdaság fejlődési folyamatai az európai nagyvárosi régiókban) kapcsolódó kutatásokat A főbb eredményeket „Comparing paths of creative knowledge regions” címen jelentették meg.

Ugyancsak folytatódott az INTERREG III/B CADSES keretében folyó GreenKeys projektet, amely a nagyvárosok zöldterület növelését célozza. Ennek során kidolgozták a program részét

képező kritérium-katalógust (ICC – Interdisciplinary Catalogue of Criteria), és elkészítették az ehhez kapcsolódó monitoring rendszer végleges változatát.

A TRACE program keretében folytatták a vízhatású területek toxikus hatású nyomfémekkel szembeni környezetérzékenységének meghatározását. A 2007-re eső részfeladatok keretében a toxikus hatású nyomfémek elérhetőségét befolyásoló tényezők monitorozására került sor. Bebizonyították, hogy vízhatású területeken a talajok redox viszonyai és kémhatása évszakos és napszakos dinamikát mutatnak. E dinamika kialakulásában a vízellátottságnak és a növényzeti mintázatoknak van a legnagyobb szerepe.

A négy éve elnyert MTA-DFG projekt („Revitalisierung von gründerzeitlichen Altbauwohnquartieren in Budapest”) c. téma technikai okok miatt 2007-ben szünetelt.

Megindították viszont az ugyancsak MTA-DFG koordináción alapuló „Zwischen Gentrification und Abwärtsspirale” c. kétéves projektet az Institut für Länderkunde közreműködésével, amelynek keretében 5 közép-európai nagyváros (Budapest, Lipcse, Vilnius, Szófia, Szentpétervár) különböző fizikai állapotú és környezetű lakónegyedeinek összehasonlító vizsgálata történik meg a hatékony városrész-rehabilitációs eljárások kidolgozásának tudományos megalapozása céljából.

Egy tudományos tanácsadójuk bekapcsolódott az UNESCO MOST-programjába, amely a történelmi belvárosok kedvező társadalmi szerkezetének megőrizhetőségét szolgálja.

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

*Az intézet legfontosabb publikációi 2007-ben*

1. Berényi I, Dövényi Z: Geographischer Exkursionsbericht : die Region zwischen Budapest – Tatabánya – Tata und die Landschaft an der Donau zwischen Esztergom und Szentendre, Nova Acta Leopoldiana 94(349): 215–235 (2007)
2. Egedy T: A történelmi belvárosok rehabilitációja vidéki nagyvárosainkban In: A történelmi városközpontok átalakulásának társadalmi hatásai (Ed. Enyedi Gy), MTA Társadalomkutató Központ, Budapest, pp 261–292 (2007)
3. Kertész Á, Centeri Cs: Hungary In: Soil erosion in Europe (Ed. Boardman J, Poesen J), John Wiley and Sons, Chichester, pp 139–153 (2006)
4. Kiss EÉ: Foreign direct investment in Hungary: industry and its spatial effects, Eastern European Economics 45(1): 6–28 (2007)
5. Kovács Z, Egedy T, Földi Zs, Keresztély K, Szabó B: Budapest: from state socialism to global capitalism: pathways to creative and knowledge-based regions AMIDSt, University of Amsterdam, Amsterdam, p. 118 (2007)
6. Michalkó G: Magyarország modern turizmusföldrajza Dialóg Campus Kiadó, Pécs, p. 288 (2007)

7. Tiner T: Távol az artériáktól: főút nélküli új kisvárosok a hazai településállományban In: A társadalmi földrajz világi (Ed. Kovács Cs, Pál V), ZTE Gazdaság- és Társadalomföldrajzi Tanszéke, Szeged, pp 491–502 (2007)

#### *Egyéb bemutatható eredmények*

Az intézet a tárgyévben is sikerrel végezte a Bábaapáti felszínalatti radioaktív hulladéktároló hosszú távú biztonságos üzemeltetéséhez kapcsolódó feladatokra, amelynek keretében kutatói átfogó geomorfológiai, geoökológiai, hidrogeográfiai, talajeróziós vizsgálatokat, továbbá demográfiai, gazdasági térszerkezeti, infrastruktúra-fejlesztési és földhasználati kutatásokat végeztek a lerakó környezetére vonatkozóan.

Korábbi eredményeikre alapozva folytatták a Paksi Atomerőmű környezetének vizsgálatát. Ennek keretében a létesítmény 30 km-es körzetében működő veszélyes üzemek felmérését és tevékenységüknek az atomerőmű biztonsági szempontjából való értékelő elemzését végezték el.

A püspökszilágyi RHFT földtani kutatásai során 2007-ben geoökológiai, lejtőkiettségi és talajeróziós vizsgálatok folytak a veszélyes hulladék-lerakóhely környezetében.

A hatékonyabb árvízvédelmet szolgáló, több éve folyó Tisza-projekt keretében folytatták a leendő tározóterek céljára kiválasztott mintaterületeken (Közép-Tisza-völgy) a felszínfejlődés lokális elemeinek vizsgálatát és geoökológiai térképezésüket az eredményesebb vízgazdálkodás megvalósítása szempontjából.

Jelentős eredményeket értek el a felszínmozgás által veszélyeztetett települések és környezetük vizsgálatában, azon belül különösen a csuszamlásveszélyes dunai magaspártok (Dunaszekcső, Dunaföldvár, Paks) várható felszínfejlődésének mérnökgeomorfológiai szempontú elemzésében és tematikus térképezésében. Utóbbiak segítségével előre jelezhetők a humánkörnyezet értékeit (épületeket, közműhálózatokat, értékes mezőgazdasági területeket stb.) veszélyeztető földmozgások (ahogyan az Dunaszekcső településen be is következett).

„Magyarország kistáj-katasztere I-II” c. szakkönyv kibővítéséhez kapcsolódóan több mint 200 tematikus térképet készítettek, amely révén a hazai táj földrajzi témájú térképállomány egyedülálló mértékben gazdagodott. A kistáj-elemzésekhez kapcsolódó, tekintélyes mennyiségű kartográfiai anyag széleskörűen tükrözi az egyes hazai kistájakat az utóbbi közel két évtizedben ért természet- és társadalomföldrajzi változásokat.

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

Intézeti kezdeményezéssel folytatódtak az eddig is jelentős hazai és nemzetközi érdeklődést keltő geomorfológiai vizsgálat-sorozatok a Mars bolygó felszínén lejátszódott felszínfejlődési folyamatok tanulmányozására a NASA-tól kapott újabb fotó-dokumentációs anyag kiértékelésével. Több bizonyítékot is találtak arra, hogy a víz egykori jelen volt a bolygó felszínén.

Széleskörű és komplex tartalmú környezeti hatástanulmányt készítettek a budapesti 4-es metró második, Keleti pályaudvar – Bosnyák tér közötti szakaszára vonatkozóan. Ennek során részletesen felmérték és értékelték a leendő metróvonalszakasz állomásaira vonatkozóan a szűkebb és tágabb hatásterület jelenlegi demográfiai viszonyait, beépítettségi jellemzőit, ipari, kereskedelmi, felszíni közlekedési, oktatási, egészségügyi, valamint idegenforgalmi funkcióit, továbbá ezek várható jövőbeni változását a metróvonal megépülése után.



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Földrajztudományi Kutatóintézet

Átlagléttség <sup>1</sup> :	46	Ebből kutató <sup>2</sup> :	25
PhD, kandidátus:	7	MTA doktora:	5
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			5
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			85
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			69
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	1
nemzetközi együttműködés keretében:	6	SCI által regisztrált folyóiratban:	1
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	0,362	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	287
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			287
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	2	könyvfejezet:	18
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	3	könyvfejezet:	6
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	46	posztterek száma:	8
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			11
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	8	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	22	Gyakorlati kurzusok száma:	10
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	27
		PhD-t:	10
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			486
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			182 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	4	Teljes saját bevétel:	127 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	6 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			10
EU forrásból:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	27 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	27 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			9
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	39 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## GEODÉZIAI ÉS GEOFIZIKAI KUTATÓINTÉZET

9400 Sopron, Csatkai u. 6–8., 9401 Sopron, Pf.5.

Telefon: (99) 508–350, Fax: (99) 508–350

e-mail: zavoti@ggki.hu, honlap: www.ggki.hu

### 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 és ügylet működtetése, fejlesztése, tematikájának következtében szükséges szeizmológiai, földmágneses, ionoszféra és geodinamikai obszervatóriumok, obszervatóriumi hálózatok, teszterület 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, mérési és adatfeldolgozási módszerek fejlesztése, adatsorok analízise és értelmezése. (A kutatásokban 5 kutató és 2 mérnök vett részt, a rendelkezésre álló pénzkeret 16 millió forint, melynek 30%-a pályázati forrást.)*

Üzemeltették a Sopronbánfalvi Geodinamikai Obszervatóriumot, továbbfejlesztették az adatfeldolgozási módszereket, folyamatosan feldolgozták a Pannon-medence extenzométeres adatait.

OTKA pályázat keretében részletesen elemezték a Sopronbánfalvi Geodinamikai Obszervatóriumban 1991 és 2006, valamint a pécsi uránbányában 1993 és 1999 között mért extenzométeres adatsorokat és megállapították, hogy a mért tektonikai mozgások sebessége változó, ami a Pannon-medencében lejátszódó jelenkori tektonikai mozgások és hegységképző erők kölcsönhatásának következménye.

Folyamatos dőlésmérést végeztek a Dunaföldvári magasparton. Elemezték a 2002 és 2006 között mért dőlésmérési és gravimetriai adatokat, a terület tektonikai és geomorfológiai sajátosságait és megállapították, hogy a geomorfológiai okok mellett tektonikai mozgás is okozhatja a partfal rendszeres omlását a vizsgált területen.

Az EOMA-KMO-1 gravimetria mérések tapasztalataiból rámutattak, hogy a mérési helyek kijelölésénél a szintezési vonal magassági profiljának ismerete is szükséges, és azon a főbb töréspontokhoz közel eső mérési helyeket kell kijelölni, hogy a mintavételezés hatása a geopotenciális értékekre minimális legyen.

A Baross Gábor regionális innovációs pályázaton elnyert műholdas szolgáltató állomás kiépítésével csatlakoztak az Európai Unió Permanens Állomáshálózatához.

*„Módszerek kifejlesztése igen kismértékű talajmozgások érzékelésére katasztrófális tömegmozgások előrejelzése céljából” című MTA elnöki keret támogatásával végzett kutatások. (A kutatásokban 4 kutató és 3 mérnök vett részt, a kapott támogatás 9 millió forint volt.)*

Gyorsulásmérőre alapozott terepi mérési módszert dolgoztak ki kismértékű mozgások kimutatására. Tesztelésére laboratóriumi vizsgálóberendezést fejlesztettek ki. Segítségével 10-100 nm amplitúdójú, különböző hullámformájú mozgások állíthatók elő.

Geodéziai teszterületet létesítettek Dunaszekcsőn a gyors partfalmozgás megfigyelésére és a kifejlesztett gyorsulásmérős mérési módszer tesztelésére. A partfalmozgások mérésénél a GPS technológia és a szabatos színtezés együttes alkalmazására eljárást alkalmaztak. A színtezett és GPS magasságok eltérése 2 mm pontossággal jellemezhető. A mozgásvizsgálati mérések eredményeit rendszeresen átadták a Katasztrófavédelmi Főigazgatóságnak a megfelelő óvintézkedések meghozása érdekében.

Háromkomponensű gyorsulásmérővel méréseket végeztek Dunaföldváron és Dunaszekcsőn a háttérzaj megállapítására.

Mérési módszert fejlesztettek ki gyorsulásmérők kalibrálására, azok rendszerjellemző függvényeinek méréssel történő meghatározására. A kifejlesztett berendezés alkalmassá tehető szupravezető graviméterek kalibrálására is. Ezáltal a világon elsőként válna lehetővé a műszerek közvetlen kalibrálása.

Osztrák-magyar TÉT együttműködés keretében is vizsgálták azokat a matematikai módszereket, amelyek segítségével viszonylag nagy háttérzajból is kiválaszthatók tipikus, kismértékű ( $10^{-9}$  m nagyságrendű) mozgások (impulzus, egységugrás, stb.).

*Elméleti eredmények (A kutatásban résztvevők száma 7 fő volt, a rendelkezésre álló pénzkeret mintegy 38 millió forintot tett ki, mely 36%-ban pályázati pénzekből eredt.)*

A geodéziai idősorok analízise során modelleket dolgoztak ki a pólusmozgás modellezésére. Tanulmányozták az időben folytonos, stacionárius, normális sztochasztikus folyamatoknak a szakirodalomban tárgyalt matematikai modelljeit. A modellek megoldásának numerikus előállításával céljuk, hogy igazolják az Arató-féle hipotézist: a megfigyelt pólus-koordináta idősorok a Chandler-periódusnál nagyobb periódusú komponenst is tartalmazhatnak.

A robusztus becslések geodéziai alkalmazásának kutatása során a Gröbner bázisra való áttéréssel speciális esetekben a nemlineáris egyenletek szigorú megoldását lehet előállítani. Vizsgálták a 3D hátrámszési probléma és a minimális távolságú vetítési probléma nemlineáris modelljeinek felállítását. A 7 paraméteres, 3D transzformációs feladat nemlineáris megoldását zárt alakban adták meg. Analitikusan igazolták azt a hipotézist, hogy a kombinatorikus megoldás egybeesik a hagyományos 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. Igazolták a két eljárás numerikus eredményeinek azonos pontosságát.

Módszert dolgoztak ki a DTM magassági hibáinak detektálására a robusztus elmélet alapján. Az általuk bevezetett medián differenciális filter nagyon gyors és hatékony módszer a DTM durva hibáinak kimutatására.

A digitális fotogrammetria kép-matching eljárásában a korrelációs együtthatót az RGB színcsatornák korrelációs együtthatóinak súlyozásával állították elő, amitől a módszer robusztusabb lett. A korreláció számítását szűrkeségi értékek használata esetén is sikerült robusztussá tenni.

Egy új optimális eljárást fejlesztettek ki a hétparaméteres hasonlósági transzformáció és a helyi rendszerben ismeretlen geoidundulációk egy lépésben történő becslésére. Az eljárás ezernél több alappont esetében is alkalmazható. A módszer segítségével a magyarországi helyi elhelyezésű vonatkoztatási rendszernek a geocentrális (GPS) rendszerhez viszonyított tájékozási paraméterei is vizsgálhatók.

#### *Geofizikai Főosztály*

*Úridőjárás-, űrklíma- és aeronómiai kutatások, amelyeknek társadalmi haszna az indukciós kockázat, illetve a globális klímaváltozás okainak jobb megértése (Résztevők: 9 kutató és 4 segéderő. A pénzügyi forrás 80%-ban pályázati és megbízási forrásokból származott.)*

Műholdas mérésekkel is alátámasztották, hogy a globális (szárazföldi) zivatartevékenység növekedése a nagy meridionális légkörczések (Hadley-cellák) száraz, hideg süllyedő légtömegekkel jellemezhető ágában, a 30°N és 30°S szélességeken következik be.

A globális zivatartevékenység ismert éves és féléves változásában a 11 éves napciklussal összefüggő modulációt mutattak ki. Az éves változás modulációjának mértéke a növekvő naptevékenységgel nő, míg a féléves hullám a napciklussal ellentétes modulációt mutat, ami a galaktikus kozmikus sugárzás 11 éves napciklus során történő változására, ill. annak villámaktivitást befolyásoló szerepére utal.

Az ionoszféra F2 rétege magasságának (hmF2) hosszú időtartamú változásában mindaddig megoldatlan problémának bizonyult hmF2 trendje területi eloszlásának a magyarázata. Mindezt a nem migráló légköri árapály pozitív és negatív fázisaival hozták kapcsolatba, aminek kialakulása elsősorban a tenger-szárazföld átmenethez kapcsolódik.

Módszert dolgoztak ki a plazmaszférában a plazmasűrűség mágneses erővonal menti eloszlásának meghatározására és összehasonlították mesterséges hold-mérésekkel.

SR tranziensek előfordulásának statisztikáját tanulmányozva megállapították, hogy az események egy csoportja 2-3 átlapolódó tranziensből áll össze és a tranziensek közötti idő nagyságrendileg annyi, amennyire az elektromágneses hullámoknak a Föld megkerüléséhez szükségük van. E különleges tranziens-párok illetve triplettek koherensen gerjesztik a Föld-Ionoszféra üregrezonátort, így a többi esethez képest több rezonanciamódus azonosítható.

Afrikai eredetű SR tranziensek azonosításával hozzájárultak ahhoz a nemzetközi projekthez, amely nagy kiterjedésű viharfrontokban előforduló villámok jellemző paramétereinek (pl. polaritás, töltés momentum) időbeli változását vizsgálja az Extremely Low Frequency (ELF, 3Hz-3kHz) tartományban észlelt jelek segítségével.

2007 nyarán Magyarországról első ízben sikerült hazánkban és Közép Európában zivatarok fölött lejátszódó, néhány ezredmásodperces időtartamú felsőlégköri fényjelenségek (vörös lidércek – sprite-ok, kék jet-ek, stb.) fényképezése egy új optikai megfigyelőrendszerrel.

Bizonyítást nyert, hogy a galaktikus kozmikus sugárzás (GKS) változásai jelentősen befolyásolhatják a légköri elektromos globális áramkör állapotát. Így a GKS-ben megjelenő 1,7 éves periódusú változást – amely korrelál a szoláris mágneses fluxus hasonló oszcillációjával – a Nagycenken mért légköri elektromos potenciálgradiens (PG) adataiban is kimutatták. A felszínen megfigyelt PG tehát valóban alkalmas a globális áramkörben bekövetkező változások követésére, ill. extraterresztrikus hatások feltárására.

Statisztikai alapokon elvégzett vizsgálat eredményei szerint a Pc3-as típusú pulzációs tevékenység és a whistlerek megjelenési gyakorisága között nincs kimutatható összefüggés. Ugyanakkor egyes rendkívül erős geomágneses perturbációs események egyéni vizsgálata alapján arra lehet következtetni, hogy ilyen alkalmakkor valóban egyértelmű korreláció mutatkozik a pulzációs aktivitás intenzitása és a szokatlanul nagy számban megjelenő whistlerek észlelése között.

Megmagyarázták a földi lökéshullám előtti térségben lejátszódó nagyenergiájú ionok szóródási folyamatának következményeként létrejövő ún. toroidális eloszlású, girációs mozgást végző ioncsoport kialakulását, és leírták a sebesség eloszlásának térbeli helyzetétől való függését.

Vizsgálták a földi lökéshullám előtti térségben található diffúz ionok térbeli fejlődését a lökéshullámtól való távolság függvényében, a 30–160 keV energiatartományban. A 10–32 keV tartományban a diffúz ionok parciális sűrűsége exponenciálisan csökken a lökéshullámtól való távolság függvényében (a mágneses erővonalak mentén), ami a diffúziós transzport egyenlettel leírható fizikai folyamatok közvetlen bizonyítéka.

A felszíni elektromágneses impedancia-tenzor komponenseinek hosszú-periódusú változásával kapcsolatban kimutatták a tenzor-komponensek határozott 27 napos és éves modulációját.

Az  $Ah$  index megerősítette korábbi eredményeiket, miszerint a hagyományosan használt  $aa$  index nem alkalmas a mágneses aktivitás hosszú távú vizsgálatára. A geomágneses aktivitás globális leképezése (évszázados időskálán) csak akkor lehetséges, ha a globális index egyenlő mértékben tartalmaz adatot egyenlítői, közép-, és szub-arktikus régiókból.

Egy egydimenziós numerikus magnetohidrodinamikai (MHD) napszélmodell számításához, amely 1 és 10 AU között (a Földtől a Szaturnuszig) szimulálja a napszél terjedését, ill. az MHD lökéshullámok kölcsönhatását, programfejlesztést végeztek.

Az interplanetáris lökéshullámok beérkezési pontosságát elemezve kimutatták, hogy a numerikus modellükkel kedvező feltételek mellett 10-15 órás pontossággal tudják megjósolni a lökéshullámok beérkezését a Jupiter vagy a Szaturnusz bolygónál.

A geomágneses INTERMAGNET-adatszolgáltatást az ARGOS rendszer helyett a DRXX rendszer végzi. Az ELF/VLF mérőrendszer átalakításával lehetővé vált az ún. trimpi effektus folyamatos megfigyelése.

*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 2 segéderő, a költségek 50-60%-ban pályázati és megbízási forrásból származnak.)*

Meghatározták a Hopkinson-csúcs laboratóriumi kimutatásához szükséges feltételeket.

A CEL7 MT szelvény mentén kirajzolódott a nagy fajlagos ellenálláskontraszt a medencék és a Keleti Alpok közei között. Míg a magyar szakaszon az elsőrendű tektonikai vonalak (Balaton, Közép-magyarország) nagy, jólvezető testek formájában jelentkeznek az E-pol-ban, amelyek mintegy 5 km mélyről nyúlnak bele a kéregbe, addig az osztrák területen csak vékony, másodrendű töréseket indikáltak mind a hegység peremén, mind annak belsejében.

Élő fa törzsén mért elektromos potenciálkülönbség (EPK) adatsorban az égereken is megjelenik a csernél kimutatott tavaszi ill. nyár eleji kettős maximum, de az égernél március közepén kezd nőni intenzíven az EPK napi amplitúdója, a csertölgynél ez március végén következik be.

Elkészült a felszíni elektróda elrendezések összegyűjtése és rendszerezése, és kiszámították az összes felszíni elektróda elrendezés paraméter-érzékenység térképeit.

Az ún. „szűrőpróba módszer”, amelyet eredetileg karsztos fekü domborzatának feltérképezésére fejlesztettek ki, egy mágneses-, radar-, és elektromos vizsgálatokkal megerősített régészeti kutatásban is bevált.

### *Szeizmológiai Főosztály*

*A nemzeti földrengés megfigyelő hálózat fejlesztése, a megfigyelések eredményeinek feldolgozása, értelmezése és társadalmi hasznosítása (3 kutató és 2 segéderő vett részt a munkában). A rendelkezésre álló pénzkeret 28 millió forint volt. A megfigyelő hálózat eszközei és ezen belül műszerei árát pályázatokból biztosították. Az állomás kiépítési, üzemeltetési valamint az adatfeldolgozási és értelmezési költségek 50%-a származik költségvetési forrásból.*

A 2004-ben megkezdett szélessávú szeizmológiai állomáshálózat 2007. évi fejlesztésének eredménye az országos szeizmológiai hálózat központjának létrehozása volt a Budapesti Földrengésjelző Observatóriumban. A távoli „on-line” állomásokról beérkező jelek valós időben nagyméretű kijelzőkön követhetők figyelemmel. További külföldi és hazai állomásokat integráltak a hazai és a Kárpát-medencebeli földrengések pontosabb meghatározására létrehozott magyar „virtuális” állomáshálózatba. Jelen formájában a hálózat 43 állomásból áll (14 magyar – ezekből 9 valósídejű és 5 „off-line” – valamint 29 külföldi). A virtuális hálózatra alapozva automatikus hipocentrum-meghatározó rendszert építettek ki, mely automatikus levélküldő rendszert is tartalmaz a nemzetközi és nemzeti adatfeldolgozó központok gyors tájékoztatása céljából.

2007-ben átlagosan havi 1500 földrengést (összesen mintegy 18000 eseményt) detektáltak. Ebből közel 200 volt az  $M_L=0,4-3,5$  magnitúdó tartományba eső helyi, illetve közeli rengés, melyek paramétereit kiszámították. E kiszámított paramétereken alapul az éves szeizmológiai bulletin. 2007 folyamán csak három olyan rengés keletkezett Magyarországon, amelyek hatásairól makroszeizmikus adatok voltak begyűjthetők. A 2006. december 31-én, Gyömrő közelében kipattant, 4,1 magnitúdójú földrengés után a helyszínen vizsgálták az épületekben keletkezett károk eloszlását. Az epicentrális terület egészét pleisztocén-holocén korú üledékek fedik, erősebben károsodott területek nem voltak elkülöníthetők. A károkat okozó fő lökés iránya DNy-ÉK-i volt. A makroszeizmikus kutatások keretében került sor a Bánát szeizmicitásának és földrengés veszélyességének vizsgálatára: összegyűjtötték és feldolgozták az 1901. április 2-i történelmi földrengés makroszeizmikus megfigyeléseit. A Bánátban több mint 600 földrengés keletkezéséről tudunk 1773 óta, melyek között 6 rengés 5,0 és 5,7 magnitúdó közé esik. Az 1901. április 2-án keletkezett VII EMS epicentrális intenzitású földrengés 12 km mélységben keletkezett. A Magyar Földrengés Katalógus adatai (kb. 20000 rengés) alapján megállapították, hogy az 1960-as évekig az éjszakai, utána a nappali földrengések dominálnak. A nappali csúcs megjelenését elsősorban a kis méretű ( $M_L < 3,2$ ) rengések 1960-as évek utáni nagyobb számban történt detektálása okozza.

A Magyar Szabványügyi Testület keretében dolgoztak az EUROCODE 8 hazai bevezetésén és a Nemzeti Melléklet elkészítésén, melynek legfontosabb része Magyarország földrengéskockázati zónatérképe. Az Országos Atomenergia Hivatal megbízásából részt vettek a Nukleáris Biztonsági Szabályzat kötetek átdolgozásán és a kiadandó útmutatók elkészítésében. Ez a nukleáris területen több évtizedre fogja meghatározni a szeizmológiai kockázatok kezelésének módját és terjedelmét. Folytatódott részvételük az Átfogó Atomcsend Egyezményt ellenőrző szervezet (CTBTO) szakértői csoportjában is.

*A szeizmológiai eredményei jelentősen hozzájárulnak a környezeti kockázatok földrengésekből eredő részének pontos meghatározásához, csökkentéséhez. A földrengés megfigyelések ugyanakkor a legfontosabb információforrást jelentik a szilárd Föld folyamatainak megismerése során, hozzájárulásuk fontos a Magyarország alatti kéreg és felső köpeny szerkezetének és folyamatainak megismeréséhez. Huszonnégy órás ügyeleti rendszerük állandóan az érdeklődők rendelkezésére állt.*

*Módszertani és földfizikai kutatások (Résztevők: 5 kutató. Forrás: 14 millió forint; 50% OTKA és egyéb pályázatok.)*

A 2007-es esztendőben tovább folytatták a hazánkban kipattant és digitálisan regisztrált földrengések hipocentrumának és fészekmechanizmusának (momentum tenzorának) meghatározását, alkalmazva az előző években kifejlesztett hullámforma inverziós módszerüket. Az eredményeket közzétették az interneten is. A földrengések fészekmechanizmusából és momentumaiból meghatározott deformációs tenzor révén megállapítható, hogy milyen nagyságú és jellegű deformáció jön létre a vizsgált területen a szeizmikus tevékenység következtében. Az így kapott eredmények a GPS mérések szolgáltatotta adatokkal összehasonlíthatók. Eredményeik szerint a GPS-szel mérhető deformációk jelentősen nagyobbaknak bizonyultak azoknál az értékeknél, amelyeket földrengés-adatok alapján számítottak. Ez arra utal, hogy a deformáció számottevő része aszeizmikus módon megy végbe.

A mikroszeizmikus zajmérések adataiból előállítható H/V görbék segítségével elvégezték a mérési pontok alatti talaj erősítő hatásának becslését. A rétegvastagságok ismeretében meghatározták a felszínközeli tartomány vertikális S-hullám sebesség eloszlását. A mikroszeizmikus zajméréseket felhasználták a fő reflektáló határfelület azonosítására és mélységének becslésére. Eredményeik jó egyezést mutattak a fúrásokból meghatározott mélységekkel és a reflexiós szeizmika eredményeivel.

Elvégezték a Kárpát-medence, Kárpát-medence+Vrancea zóna és a Dinári hegység földrengéseinek fraktális vizsgálatát. A fraktál dimenzió értéke nő a földrengés intenzitás növekedésével: a Kárpát-medence esetében a legkisebb a fraktál dimenzió értéke ( $D=0,3$ ), míg a másik két aktívabb zóna esetében  $D=0,5$  és  $0,7$ .

A köpenybeli áramlások vizsgálatához kétféle viszkozitás modellt fejlesztettek ki. A csak mélységfüggő viszkozitás modell a belső szerkezet hatását tükrözi. A feláramlások keltette felszíni topográfia és geoid modellezéséhez szükséges, hogy a viszkozitás modell a hőmérséklet mélység szerinti eloszlását is magába foglalja.

Megmutatták: a zonális árapály a Föld forgássebességének  $10^{20}$  energiájú változásait kelti két- és négyhetes periódussal, amelyek jelentősen meghaladják még a legnagyobb földrengések fészkeiben felhalmozódó rugalmas energiát ( $\leq 10^{19}$  J) is.

Az IERS (Observatoire d'Paris) és az OTA Oceanográfiai Intézet kutatóival együttműködve megmutatták, hogy a földmágneses excentrikus dipolikus tér időbeli változásai szoros statisztikus kapcsolatban állnak a pólusmozgás összetevőivel a dekadális (10-70 év) periódusok tartományában.

Belga és lengyel kutatókkal közösen vizsgálták a földmag kialakulásának és fejlődésének történetét. Bár a Föld vas magja a bolygókeletkezés lezárulta után rövid idővel kialakult, sugara a mainak kb. fele kellett, hogy legyen. A mag fejlődésének megismerése döntő fontossággal bír a geotermikus, a földmágneses és a tektonikai folyamatok értelmezése terén.

*A Geodéziai Főosztállyal közösen végzett módszertani kutatómunkában három kutató vett részt. Az együttműködés pénzügyi fedezetét kutatási projektek (OTKA, NATO, MTA-Bolgár TA bilaterális) biztosították.*

NATO bilaterális együttműködés keretében, Bulgáriában és Magyarországon paleorengés keltette maximális horizontális gyorsulások értékének meghatározása céljából, megmérték cseppkövek sajátfrekvenciáit és méreteit. Megállapították, hogy a Balkán-hegység nyugati részén nem keletkezhetett 7-es intenzitási foknál nagyobb rengés az elmúlt 10 ezer évben.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

#### *Hazai intézményi kapcsolatok*

MTA X. Osztály (két tag), MTA Geodéziai Tudományos Bizottság (elnök), Geofizikai Tudományos Bizottság, Doktori Bizottság, VEAB szak- és munkabizottságok, Úrkutatói Tudományos Tanács, UGGI, IAGA, COSPAR, URSI, IAG, IASPEI EASE, EAEE, IAEE, Nemzetközi Litoszféra Program nemzeti bizottságai, MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíj



Kuratórium (2 fő), Földtudományi Szakértői Kollégiuma, Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézet, Magyar Állami Földtani Intézet, ELTE, Miskolci Egyetem, MFTTT elnöksége, Magyar Geofizikusok Egyesülete, Magyar Asztronautikai Társaság, Kormányzati Koordinációs Bizottság Tudományos Tanácsa, MTA Matematikai és Természettudományi Kuratórium, MTA Matematikai és Természettudományi Kuratórium fiatal kutatói albizottsága, AKVT, 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), MAB Föld- és Környezettudományi Bizottság, Föld Bolygó Nemzetközi Éve Magyar Nemzeti Bizottság.

#### *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 (Deputy Editor), Journal of Applied Geodesy (Editorial Board).

Contributions to Geophysics and Geodesy (Advisory Board).

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

IAGA 11th Scientific Assembly (Sopron, 2009. augusztus 23-30.) szervezőbizottság, Részvétel az E-STAR (European Solar Terrestrial and Atmospheric Research) programban.

COST 296, WP1.4, 2.2 (Mitigation of Ionospheric Effects on Radio Systems), COST 625, COST 721, COST P18 (The Physics of Lightning Flash and its Effects).

Journal of Geophysical Research, Studia Geophysica et Geodaetica, Journal of Geodynamics, Geophysical Prospecting, Geophysics, Terra Nova stb. cikkek bírálata.

Brémai Nemzetközi Egyetem, Prágai Légkörfizikai Intézet, Pekingi Földtudományi Intézet, L'Aquila-i Egyetem, Bécsi Akadémia Úrkutatási 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 és annak SC3 munkacsoportja: 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).

*Külföldi oktatási tevékenység*

Doktorandusz képzés és vizsgáztatás a Bécsi Műszaki Egyetemen,  
Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár: Általános és alkalmazott geofizika tárgyak.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

##### *Hazai pályázatok*

Az intézet 8 OTKA-pályázatot gondoz, illetve nyert el:

K-046264: A földi árapály és a vele kapcsolatos geodinamikai jelenségek mérési módszereinek továbbfejlesztése, a Pannon medencében regisztrált adatok feldolgozása és komplex értelmezése

K-043413: Új direkt és inverz módszerek a nehézségi erőtér szintetikus modellezésében

K-049604: Nem konvencionális geoelektromos elrendezések

K-042572: Lokális földrengések hipocentrumának és fészekmechanizmusának meghatározása

NI-61013: Geoelektromágnesség és a változó Föld – tudományos iskolai projekt

K-061800: Korszerű matematikai modellek alkalmazása a geodéziában

K-060394: A földforgásvektor kölcsönhatása geodinamikai folyamatokkal

K-68475: Mágneses fázisátalakulás a földkéregben és geofizikai következményei

K-72474: A troposféra és az ionosféra közötti elektrodinamikai csatolás tanulmányozása villámok ELF-sugárzása révén

- NKTH: Geofizika
- NKTH: Öveges József pályázat
- MŰI Költségvetési Támogatási Pályázat
- MŰI TP224: Földi gamma-sugár felvillanások
- MŰI TP121: A magnetosféra vizsgálata
- NIIFP: Számítóközpont fejlesztése

ND\_INRG\_05- PERMSZOL-297-10 Baross G. Program: Permanens műholdas szolgáltató állomás létesítése regionális műszaki és környezetgazdálkodási innovációk támogatására.

##### *Nemzetközi pályázatok*

EVG1-2001-00061 OASYS, Földcsuszamlás riasztó rendszer integrált optimalizációja, (EU5)

G1RT-CT-2001-05040, SAMCO, Szerkezetek becslése, monitorozása és ellenőrzése, (EU5)

MT projekt-megbízás az Osztrák Tudományos Akadémiától, ill. a Bécsi Műszaki Egyetemtől

EVR1-CT-2002-00507, MEREDIAN-2, Szeizmológiai hálózatok fejlesztése, (EU5)

NATO Collaborative Linkage Grant (ESP.EAP. CLG.981966)

##### *MTA bilaterális együttműködések*

DFG-MTA: A Liouville egyenlet geodinamikai alkalmazása

CNRS-MTA: Oscillations of polar motion influenced by seismic activity

Orosz-Magyar: Extenzométeres mérések eredményeinek értelmezése, árapály súrlódás  
Román-Magyar: A Kárpát-medence tektonikai mozgásvizsgálata  
Szlovák-Magyar: Extenzométeres mérések  
Bolgár-Magyar: Földrengéskockázat becslési eljárások fejlesztése  
CNRS\_MTA: Földforgás és földrengés aktivitás kapcsolatának kutatása  
Ukrán-Magyar: Magnetotellurika  
Lengyel-Magyar: Schumann rezonanciák mérése poláris és közép-európai állomásokon

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

1. Mentés Gy, 2007: Observation of recent tectonic movements in the Pannonian Basin, J. Geodyn., doi:10.1016/j.jog.2007.10.001. OTKA K04626
2. Greenberg, E, Price C, Yair, Y, Ganot, M, Bór J, Sátori G: ELF Transients associated with sprites and ELVES in Eastern Mediterranean winter thunderstorms, J. Atmos. Solar-Terrest. Phys., 69, 13, 1569–1586, doi:10.1016/j.jastp. 2007.06.002, OTKA NI61013
3. Kis A, Scholer, M, Klecker, B, Kucharek, H, Lucek, EA, Reme, H: Scattering of Field-Aligned Beam Ions Upstream of Earth's Bow Shock; Ann. Geophys., 25, 785–799 (2007)
4. Sátori G, Mariusz, N, Williams, E, Szendrői J: Signature of the day-night asymmetry of the Earth-ionosphere cavity in high time-resolution Schumann resonance records. Radio Science . 42, RS2S10, doi:10.1029/2006RS003483, OTKA NI61013 (2007)
5. Williams, E, Sátori G: Solar Radiation-Induced Changes in Ionospheric Height and the Schumann Resonance Waveguide on Different Time Scales, Radio Science , 42, RS2S11, DOI:10.1029/2006RS003494, OTKA NI61013 (2007)
6. Vogt, J, Zieger B, Glassmeier, K-H, Stadelmann, A, Kallenrode, M-B, Sinnhuber, M, Winkler, H: Energetic Particles in the Paleomagnetosphere: Reduced Dipole. (2007)
7. Configurations and Quadrupolar Contributions, Journal of Geophysical Research, 112, A06216, OTKA NI 61013 (2007)
8. Hetényi Gy, Bus Z: Shear wave velocity and crustal thickness in the Pannonian Basin from receiver function inversions at four permanent stations in Hungary. Journal of Seismology, 11 (4), 405-414, doi: 10.1007/s10950-007-9060-4. (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet

Átlagléttség <sup>1</sup> :	67	Ebből kutató <sup>2</sup> :	32
PhD, kandidátus:	14	MTA doktora:	4
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			10
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			76
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			73
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	7
nemzetközi együttműködés keretében:	35	SCI által regisztrált folyóiratban:	7
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	14,222	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	385
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			286
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	1	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	2	könyvfejezet:	9
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	37	posztterek száma:	18
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	27	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			22
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	10	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	17	Gyakorlati kurzusok száma:	7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	0
		PhD-t:	7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			210
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			278 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	2	Teljes saját bevétel:	53 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			8
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	37 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			6
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			8 MFt

## **GEOKÉMIAI KUTATÓINTÉZET**

1112 Budapest, Budaörsi út 45.

Telefon/Fax: 319-3137

e-mail: demeny@geochem.hu, honlap: <http://www.geochem.hu>

### **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Az intézet fő feladata geokémiai alap kutatások végzése a kőzetgenetika, az ásványi nyersanyagképződés és a környezetgeokémia területén. Így a korábbi évekhez hasonlóan a beszámolási évben is folytatták a nagy hagyományokkal és széleskörű szakmai elismertséggel rendelkező klasszikus alap kutatási témák művelését. Vizsgálták a magmás és metamorf képződmények, illetve a velük együtt előforduló fluidumok képződési körülményeit és jellegzetességeit, továbbá az ásványi nyersanyagok genetikáját. Környezettudományi kutatásaik keretében tanulmányozták a múltbeli és jelenkori környezet állapotának változásait. Kutatták a nehézfémek talajbeli viselkedését, a közelmúlt klímaváltozásait dokumentáló változatos földtani képződmények geokémiai jellegét, továbbá a hévizek szerves komponenseinek sajátosságait. Tanulmányozták az épített környezetet és a kulturális örökségünk tárgyi emlékeit ért antropogén hatásokat is. Folytatták a nagy aktivitású radioaktív hulladékok elhelyezésére kiválasztott földtani képződmény egyes kifejlődéseinek komplex geokémiai vizsgálatát.

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

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

A metamorf ásvány-kőzettani kutatásaik során az energiavesztéses spektroszkópia újszerű alkalmazásával igazolták, hogy koegzisztens kálium- és nátrium-csillámok esetén az ammóniumion az előbbit preferálja. A kőzetkémizmus, a metamorf nyomás, valamint a paragonit és az említett csillámtípusok előfordulási törvényszerűségeit több geológiai objektum nagyszámú kőzetmintáinak adatbázisát felhasználva határozták meg. A világos csillámok kémiai és szerkezeti változásain alapuló petrogenetikai ismereteket a Kelet-Bükk egyik fontos nyírásos zónájának komplex szerkezeti-ásvány-kőzettani értékelésénél, valamint a Rudabányai-hegység tektonometamorf fejlődéstörténeti rekonstrukciójánál is felhasználták.

Korábbi filloszilikát kristályossági vizsgálataik eredményeit nemzetközi munkacsoportban újraértékelve hozzájárultak a Tethysi Himalaya (Nepál) devon-triász korú üledékes összletei metamorfózisának termokronológiai és tektonikai rekonstrukciójához. Az illit és klorit „kristályossági” indexeken alapuló metamorf zóna meghatározási módszert a kalcit „kristályossági” index és átlagos krisztallitméret adataival korrelálták. Megállapították, hogy a metamorf kőzetek tömeges kalcitjának „kristályossági” indexe és doménmérete függ a litológiától. Így a kalcit röntgen-pordiffrakciós profiljából számolható paraméterek szintén hasznos eszköznek bizonyulhatnak a metamorfózis fokának megállapításához.

A monacit U-Pb tartalmán alapuló módszerrel meghatározták a Szlavóniai-hegység (Horvátország) közepes fokú metamorfizis korát. Befejezték az ún. mellétei kékpálák (Szlovákia) egyik kiválasztott feltárásának részletes ásvány-kőzettani vizsgálatát is. A kékpala fáciesű metapélitok gránátot, glaukofánt és fengites csillámot tartalmaznak, alkalmanként ezekhez klorit, albit vagy zoizit társul. A mintasorozat az alpi (jura) szubdukció során az ún. Mellétei-óceán egykori üledékes közetsorozatának átalakulásával képződött.

A horvátországi Medvednica hegység takarós egységeinek vizsgálatával megállapították, hogy a két felső egységet a legalsó egységhez képest kb. 250 °C-kal alacsonyabb hőmérsékletű átalakulás érte, melynek időbeli elhelyezése kérdéses. Valószínűsíthető, hogy a metamorfózis egy nem megőrződött, kérdéses eredetű takarós egység rátolódásához köthető, azaz az összletet ún. transzportált metamorfózis érte. A hegység közetsorozatainak metamorf foka a kapott eredmények alapján leginkább a Szendrői-hegység paleozoos összleteinek átalakultsági fokához hasonlítható.

Az International Union of Geological Sciences metamorf kőzettani albizottsága (Subcommission on the Systematics of Metamorphic Rocks) 1987-óta tartó munkájának eredményeként a Cambridge University Press kiadásában megjelent a metamorf kőzetek és jelenségek első teljes rendszere és értelmező szótára. Az intézet egyik kutatója az albizottság tagjaként és az egyik, több mint 30 fős nemzetközi munkacsoport vezetőjeként – társszerzőkkel – fejezetet írt a kisméretű (kis hőmérsékletű) metamorf kőzetek rendszerezéséről, nevezéktanáról. A könyv – remélhetően hosszú időre – alapműként szolgál majd a közös tudományos nyelv használatának kialakításához világszerte.

A metamorf ásvány-kőzettani kutatások eredményeinek hasznosulása elsősorban földtani alapkutatási jellegű. Ezek az eredmények hozzájárulnak a hazai metamorf képződmények jobb megismeréséhez, ezáltal a Pannon-medence pontosabb geodinamikai rekonstrukciójához. A kutatásokban 18 kutató vett részt, ebből 6 fő volt a GKKI alkalmazásában. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 3,2 M Ft volt, további 7 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.

*Magmás kőzetan-geokémiai kutatásaik* körében folytatták a Kanári-szigetek létrejöttét meghatározó nagymélységű magmafeláramlás (ún. plume) anyagának vizsgálatát. Megállapították, hogy a kezdeti vulkanizmushoz kapcsolódó magmás anyag összetétele egy normál felsőköpenybeli és egy ettől eltérő, valószínűleg részben az alsó köpenyből származó, részben szubdukcióval a köpenybe jutott, korábban felszíni átalakulást szenvedett komponens keveredését mutatja. Meghatározták továbbá a La Gomera vulkáni szigetének gyökérszélén lejátszódott oldat-kőzet kölcsönhatás okait is.

Folytatódott a polikristályos gyémántok, más néven diamondit xenolitok kutatása is. Eredményeik szerint mind a Cr-dús (peridotitos), mind a Cr-szegény (eklogitos) gránátot és gyémántot kristályosító fluidum peridotitos forrásból ered, a különbség elsősorban a parciális olvadás mértékében van. Kimutatták továbbá, hogy a gyémánttal előforduló Cr-pirop metasomatikus eredetű. Az év folyamán újabb kísérlet sorozatot végeztek, mind grafit-karbonát-Mg-dús eklogit, mind grafit-karbonát-peridotit rendszerekben, a gyémánt stabilitás tartományában. Tapasztalataik szerint az eklogitos kísérleti rendszerekben elsőként a gránát kristályosodott, ezt a gránát és klinopiroxén, majd gránát, klinopiroxén és magnezit együttes kristályosodása követte. Klinopiroxén-gránát szételegyedést tanulmányoztak egy

Obnazsonnaja kimberlitből (Oroszország) származó eklogit xenolit klinopiroxénjében. Megállapították, hogy a gránáttal kompatibilis nyomelemek (Sc, Y, nehéz lantanidák) erősen frakcionálódtak a szekvenciális szételegyedés során és a nyomelemek frakcionációját a diffúzió kontrollálta.

Az erdélyi Persányi-hegységből származó köpenyeredetű gránát piroxenit xenolitok termobarometriai vizsgálata során a xenolitokra 1030–1140 °C egyensúlyi hőmérsékletet és 1.4–1.7 GPa nyomást kaptak. A klinopiroxén és a gránát nyomelemei alapján a teljes xenolit MORB-hoz hasonló rekonstruált nyomelemtartalmat mutat. A gránát peridotit valószínűleg a litosféra köpenybe benyomult tholeiites jellegű bázisos olvadékok kristályosodási terméke, amely jelenleg még nem követhető felszínen is kimutatható vulkáni tevékenységhez.

Az MTA Izotópkutató Intézettel kötött kutatási együttműködési szerződés keretében (Geoanalitikai Kutatócsoport) sikerrel alkalmazták a lézer-ablációs ICP-MS módszert a geológiai minták (peridotit és granulit xenolitok ásványainak) nyomelemzésére. Az első méréseket korábban már elemzett, jól ismert összetételű klinopiroxén, amfibol, gránát, plagioklász és üveg mintákon végezték, és az eredmények nagyon jó egyezést mutattak a korábban mért adatokkal.

A magmás kőzettani-geokémiai eredmények elsősorban alapkutatási jellegűek. Ezen kutatások során szerzett módszertani és metodikai tapasztalatokat azonban az archeometriai és környezetgeokémiai kutatásokban is lehet alkalmazni. A kutatásokban 8 kutató vett részt, ebből 3 fő a GKKI alkalmazottja. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 2,5 M Ft volt, további 5 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.

A hazai *ásványi nyersanyagok kutatását* folytatva a Dunántúli-középhegység jura időszakában felhalmozódott üledékes környezetű Mn-telepek vasas, kovás, oxidos, illetve vasas, oxidos képződményeinek ásványtani, geokémiai és szöveti vizsgálatát végezték el. Számos mélyfúrás és fúrasi magminta kémiai adatsorainak matematikai statisztikai és 3D térinformatikai feldolgozását végezték el. Ősmaradványokat tartalmazó mangán-karbonátos konkreciók CT vizsgálatát végezték el a fossziliák jellemzése céljából.

Az eredmények az ércképződés folyamatának megértését segítik elő, de közvetve a környezetszennyezés és elhárítás, valamint a bánya-rekultivációs tevékenység keretében hasznosíthatók. Az eredményeket 7 fős kutatócsoport érte el, ebből 5 fő volt a GKKI alkalmazásában. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 0,5 M Ft volt, további 1 M Ft pályázati forrásból származott.

#### *A földtani környezet geokémiai állapotának és változásainak vizsgálata*

Folytatták a Bodai Aleurit Formáció, mint a *nagy radioaktivitású hulladékok elhelyezésére kiválasztott földtani képződmény* analcímfészkes agyagkő változatának radionuklid szorpciós tulajdonságainak, valamint a kőzet oldhatóságának a vizsgálatát. Az alábbi radionuklid affinitási sort állapították meg: Sr > Co > Cs. Minden vizsgált elem nagy affinitást mutatott a kőzet felé. A Sr és Co esetében a kicsapódás és az ioncsere a fő megkötődési folyamatok, míg a Cs-nál ezen folyamatokra utaló adatot nem nyertek. A kőzet jelentős karbonáttartalmát, valamint a felszín alatti víz kémiai jellemzőit figyelembe véve az analcímfészkes agyagkő hatékonyan tudja gátolni az esetlegesen a tározóból kikerülő radionuklidok mozgását. A

kioldásos kísérletek a kőzet nagy stabilitását mutatták rövid távon (<56 nap) és viszonylag széles hőmérséklettartományban (25–90°C). A természetes körülmények kis változásakor nem kell számolni az analcím-fészkes agyagkő átalakulásával lúgos körülmények között. Az agyagásványok átalakulása erősen alkáli körülmények között kis mértékben előfordulhat, azonban az újonnan képződő zeolitfázisok újabb adszorpciós helyeket szolgáltathatnak a radionuklidok számára.

Az eredmények a nagy radioaktivitású hulladékok földtani környezetben történő elhelyezésének biztonságát növelik, új alapadatokat szolgáltatva a tervezéshez. A vizsgálatoknak regionális, sőt országos jelentősége van, hiszen a radioaktív hulladékok tárolójának esetleges működési zavara a regionális életminőséget rendkívüli mértékben ronthatja, az esetleges kárelhárítással kapcsolatosan felmerülő költségek pedig nemzetgazdasági mértékűek lehetnek. Az eredményeket 5 fős kutatócsoport érte el, ezek mindegyike a GKKI alkalmazottja. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 5,4 M Ft volt, további 2,4 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.

*A nehézfémek geokémiai körforgalmának vizsgálata* témakörben elvégzett kutatásaik szerint a különböző rétegtöltésű réz- és ólomadszorbeált montmorillonitok szerkezeti tulajdonságai kis számú (~20) nedvesítési-kiszáritási ciklus után jelentősen még nem változnak. Barna erdőtalajok felhalmozódási szintjében kimutatták, hogy a klorit pedogén vermikulittá történő átalakulása növeli a talajagyagok rézadszorpcióját. Hasonlóan megnöveli a megkötött fém mennyiségét az ásványok felületén levő vasas bevonat is. Analitikai transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatok újszerű alkalmazásával bizonyították, hogy az illit/szmektit kevert szerkezetű agyagásványban a réz megkötődéséért elsősorban a szmektit komponens a felelős.

A talaj-nehézfém kapcsolat mélyreható vizsgálatának eredményei megkönnyíthetik a szennyezések pontos elkülönítésének, lehatárolásának és viselkedésének megértését. Ezen feladatok elvégzése alapvető környezetvédelmi érdek. Az eredményeket 8 fős kutatócsoport érte el, ebből 3 fő volt a GKKI alkalmazottja. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 1 M Ft volt, további 2 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.

*A paleoklimatológiai kutatásaik* keretében Barlangi képződmények karbonátmintáin nyomon követték az utolsó 4800 év klímaeseményeit kimutatva egy lehűléssel és csapadékmennyiség változással járó, több lépésben bekövetkezett éghajlat-változási ciklust. Speciális geokémiai vizsgálatokkal tovább pontosították a korábban kimutatott középső bronzkori klímaváltozást is. A kb. 3500-3600 évvel ezelőtt bekövetkezett változások egybeesnek a Théra vulkánkitörés (Görögország) időpontjával, továbbá a cseppkő szerkezetébe beépülő nyomelemek és stroncium-izotóparányok a vulkáni por jelenlétét, barlangba mosódását jelzik. Az elmúlt 2500 évet lefedő, jól laminált cseppkő vizsgálatával (kormeghatározásokkal, továbbá az elmúlt ezer évet lefedő szakasz nagy felbontású stabilizotóp-geokémiai vizsgálatával) a kutatások jól kapcsolódnak a MILLENNIUM European Climate c. Európai Unió 6-os keretprogram keretében zajló projektbe.

Édesvízi mészkövek vizsgálatával megállapították, hogy a paleohidrológiai aktivitás változását és a forrástevékenység időnkénti áthelyeződését a stabilizotópos vizsgálatokkal és az U/Th sorozatos kormeghatározással jól nyomon lehet követni. A képződmények kora, eredete, képződési környezete (a Duna-teraszokkal való kapcsolata) és a képződés idején fennálló klíma rekonstrukciója az ilyen típusú vizsgálatokkal tovább pontosítható.



A kagylóhéjak stabilizotópos összetételén alapuló környezet- és klímarekonstrukció alapvető feltétele a víz-karbonát frakcionációjának meghatározása illetve a hőmérséklet hatásának vizsgálata recens héjak segítségével monitorozott körülmények között. Ennek érdekében recens vizsgálatok végeztek *Unio pictorum* és *Dreissena polymorpha* fajokon.

A Kárpát-medencebeli klímarekonstrukció újabb módszerekkel történő kiegészítése jelentősen hozzájárulhat a tudományos alapokra épülő, egyre pontosabb klímaváltozási forgatókönyvek megalkotásához. A fenti paleoklimatológiai vizsgálatokat 6 fős kutatócsoport végezte el, mindannyian a GKKI alkalmazottjai. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 3,9 M Ft volt, további 5,6 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.

*Vízgeokémiai kutatásaik* során a vízkörforgás legkevésbé ismert elemeit (felszíni csapadékvíz és barlangi csepegő vizek) folyamatosan mintázták és elemezték. A cseppkő képződéséhez hozzájáruló víz (csapadék és csepegő víz) és a kicsapódó karbonát izotóparányainak összevetése érdekében megkezdték egy kijelölt budai barlang (Szemlő-barlang) csepegő vízmintáin az oxigén és hidrogénizotóp értékek meghatározását. Vizsgálták továbbá Budapest és környéke vízáramlási rendszereit. Megállapították, hogy a rendkívül bonyolult rendszerben legalább három komponens keveredik (jégkorszaki beszivárgású víz, továbbá két különböző holocén beszivárgású víz) más-más arányban. Egy negyedik komponens (fosszilis tengervíz) egyes helyeken való megjelenése szintén valószínűsíthető.

A kutatott áramlási modell hátteret szolgáltat a tervezhető vízminőség megbízható szolgáltatásához. A vízgeokémiai kutatásokban 5 fő vett részt, ebből kettő a GKKI alkalmazottja. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 2,7 M Ft volt, további 3,7 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.

*A hazai hévizek szervesanyag-tartalmának vizsgálata* körében a humin- és fulvosavak hőmérsékletfüggését vizsgálták hat termálkútból származó vízben, melyek kifolyási hőmérséklete 46 és 92 °C között változott. Összehasonlították az elemi összetételt és a jellegzetes funkciós csoportok változását mindkét preparált sav esetében. Megállapították, hogy a huminsavak több alifás csoportot tartalmaztak és gazdagabbak nitrogénben és kénben, továbbá nagyobbak a nitrogén-kén atomi hányadosaik, míg a fulvosavak kevesebb aromás szerkezetet tartalmaznak és nagyobb az oxigéntartalmuk és hidrogén-kén atomi hányadosuk. Előzetes izotóparány-méréseik alapján a termálvizekben található aromás szénhidrogének legvalószínűbb forrásai a fenti komponensek lehetnek.

A fenti vizsgálatok alapvető fontosságúak a hévizek minősítése szempontjából. Ezek a képződmények turisztikai vonzerejük révén számos régió legfontosabb gazdasági lehetőségét képviselik. Az eredményeket 4 fős kutatócsoport érte el, ebből 2 fő volt a GKKI alkalmazottja. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 3,9 M Ft volt, további 5,6 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.

*A kulturális örökség vizsgálata* témakörben geokémiai kutatási módszerek alkalmazásával a működő mállási folyamatainak feltárásában módszert fejlesztettek ki a működő-természetes kőzet kontaktusokon végbemenő átalakulások mennyiségi és minőségi meghatározásához. A közettisztítási eljárások hatékonyságának meghatározásához, illetve azok roncsolást előidéző mértékének megállapításához új röntgendiffrakciós diagnosztikai eljárást vezettek be.

Magyarország egyik leghíresebb késő-rézkori régészeti lelőhelye a Badeni Kultúrához sorolt, agyagból készült kocsi modellt is tartalmazó budakalászi temető, ahol több száz sírból jelentős mennyiségű, ékszerként alkalmazott kagyló és csiga héjanyag került elő. A Geokémiai Kutatóintézet kutatói az MTA Régészeti Intézetével történt együttműködés során a budakalászi sírleletek karbonátgyöngyeinek stabilizotóp-geokémiai elemzését végezték el. A stabilizotóp-összetételek alapján jól elkülöníthetőek a mészkőgyöngyök, a miocén héjából készített díszítőelemek, valamint a tavi-folyami kagylólemezek. A mészkőgyöngyök több közettípusból készültek. Döntő részben édesvízi mészkő az anyaguk, amelynek lelőhelyét részben a budakalászi előfordulásban találhatjuk meg. Az adatok alapján azonban az egyébként édesvízi mészkőként meghatározható minták egy részét az eddig vizsgált budai-hegységi és gerecei előfordulások egyikével sem lehet párhuzamba vonni. Az összetételek és katódlumineszcens mikroszkópi megfigyelések jó alapot nyújthatnak a későbbiekben a díszítőelemek lelőhelyének pontos meghatározásához.

A kulturális örökség vizsgálatának eredményeit 6 fős kutatócsoport érte el, mindannyian a GKKI alkalmazottjai. Az intézeti ráfordítás 5,7 M Ft volt.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

*A metamorf ásvány-kőzettani kutatások keretében a hazai intézmények közül elsősorban az MTA Atommagkutató Intézetével, az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével, a Magyar Állami Földtani Intézettel és az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel működtek együtt.*

Ebben a témakörben hivatalos nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn TÉT pályázatok keretében a zágrábi egyetemmel (Horvátország). A magyar-horvát TÉT pályázatban tervezett együttműködés megindításához a témavezető halasztást kért. A magyar témavezető 4 napos tanulmányutat tett Zágrábban, ahol egy jövőben elkészülő publikáció tárgyában folytatott megbeszéléseket.

A témakörben további informális nemzetközi együttműködést folytattak a baltimore-i Johns Hopkins Egyetemmel, a granadai, az oviedoi, a padovai, a pozsonyi, a salzburgi egyetemekkel, valamint a Krétai Műszaki Egyetemmel, a negevi Ben Gurion Egyetemmel és a Brit Földtani Szolgálattal.

*A magmás kőzetan-geokémiai kutatásait a hazai kutatóhelyek közül a Természettudományi Múzeummal, az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel valamint az MTA-ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoportjával együttműködésben végezték. Kutatási együttműködési szerződést kötöttek az MTA Izotópkutató Intézetével a korszerű analitikai módszerek geológiai mintákon történő alkalmazására. A szerződés keretében az intézetek kutatóinak részvételével megalakították a Geoanalitikai Kutatócsoportot.*

A Kanári-szigetek vulkanizmusának geokémiai vizsgálata TÉT kutatási projekt keretében zajlik. A beszámolási évben két magyar kutató töltött 2 hetet a La Lagunai Egyetemen (Spanyolország), illetve végzett terepi mintavételezést Tenerife szigetén. Emellett

előkészítették az eredmények publikálását és nemzetközi konferencián történő bemutatását. A polikristályos gyémántok kutatásában zajló informális együttműködést az Osztrák és Magyar Tudományos Akadémiák közötti kétoldalú egyezmény keretében biztosított 1 hetes konzultációs és dokumentációs utazás is segítette.

A témakörben informális nemzetközi kutatási kapcsolatot tartottak fenn a bécsi Naturhistorisches Museum-mal, valamint a müncheni és a lausanne-i egyetemekkel.

A *hazai ásványi nyersanyagok kutatása* sokrétű informális hazai és nemzetközi együttműködés keretében folyt. Magyarországon elsősorban az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel, a Magyar Állami Földtani Intézettel, a Szent István Egyetemmel és a Kaposvári Diagnosztikai Központtal működtek együtt. Az Amerikai Geológiai Szolgálattal, az Orosz Tudományos Akadémiával, a Kanazawa Egyetemmel (Japán) és a lyoni Claude Bernard Egyetemmel (Franciaország) informális nemzetközi együttműködést folytattak.

A *talajok környezetgeokémiai és -ásványtani kutatása* az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével és az MTA Anyagtudományi és Környezetkémiai Kutatóintézetével, valamint a granadai és a jaeni egyetemekkel (Spanyolország) együttműködve történt.

A *paleoklimatológiai tanulmányok* elsősorban az MTA-ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport, az Eötvös Loránd Tudományegyetem és az MTA-MTM Őslénytani Kutatócsoport kutatóival közös kutatómunka keretében folytak. Magyar-török TÉT pályázat keretei között folyik együttműködés a denizli-i Pamukkale University-vel az édesvízi mészkövek kutatása kapcsán. További informális kapcsolatot tartottak fenn a Szegedi Tudományegyetemmel, a Magyar Állami Földtani Intézettel, továbbá a NASA Goddard Space Flight Center (USA), a hannoveri Leibniz Institute for Applied Geosciences (Németország), az University of Taipei (Tajvan), a Forest Research and Management Institute (Norvégia) és a Zágrábi Egyetem kutatóival.

*Vízgeokémiai kutatásaikat* az Eötvös Loránd Tudományegyetem, az MTA Atommagkutató Intézet, a Magyar Állami Földtani Intézet, a VITUKI Kht, valamint a GWIS Kft. munkatársaival együttműködve végezték. Kutatásaik során nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn a lublini Maria Curie-Skłodowska Egyetemmel, a denizli-i Pamukkale University-vel és a san antonio-i University of Texas munkatársaival.

A *hévizsek szerves anyagainak vizsgálata* során a Magyar Állami Földtani Intézettel, a Szegedi Tudományegyetemmel és az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével működtek együtt. További informális nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn a wroclavi, a manchesteri és a newcastlei egyetemekkel.

A *kulturális örökség vizsgálata* témakörben a Régészeti Intézettel, a Magyar Nemzeti Múzeummal, a Kulturális Örökségvédelmi Hivatallal, az MTA Művészettörténeti Kutatóintézetével, az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel, valamint a Tübingeni Egyetemmel folytattak közös kutatásokat.

Az intézet igazgatója az International Association of Geochemistry and Cosmochemistry, valamint az International Union of Geological Sciences Magyar Nemzeti Bizottságának titkára. Egy további kutató az utóbbi bizottság tagja. Az intézet igazgatója az European

Science Foundation értékelő bizottságának tagja. Az intézet egy kutatója részt vett az IUGS Subcommission on Systematics of Metamorphic Rocks munkájában, az albizottság tagjaként és a Very low-grade metamorphic rocks nemzetközi munkacsoport vezetőjeként. Az intézet egy munkatársa tagja az International Eclogite Conference Tanácsának, egy további kutató pedig az IUGS INHIGEO, a Nemzetközi Földtani Bizottság tagja.

A GKKI igazgatója az MTA Geokémiai és Ásvány-Közzettani Tudományos Bizottság titkára, két további kutató a bizottság tagja. Két kutató tagja az MTA Geonómiai Tudományos Bizottságának, közülük az egyik a Geonómiai Albizottság elnöke is. Az intézet igazgatója tagja az MTA Bolyai János Ösztöndíj Szakértői Kollégiumnak. Egy kutató a Magyarhoni Földtani Társulat tiszteleti tagja, az intézet igazgatója mellett az MFT választmányának tagja. Egy további kutató az MFT Ásványtan-Geokémiai Szakosztály vezetőségi tagja. Az intézet egy munkatársa az MFT Tudománytörténeti Szakosztályának elnöke, egy másik az MFT Agyagásványtani Szakosztályának titkára. Az intézet vezetője az OTKA Földtudomány 1 zsűri elnöke volt.

Egy-egy kutató tagja az Acta Geologica Hungarica, valamint az Acta Mineralogica et Petrographica folyóiratok szerkesztő bizottságának. Egy kutató tagja volt a 2007. október 24–27. között megrendezett 9th European Meeting on Ancient Ceramics nemzetközi konferencia szervező bizottságának.

A GKKI egy munkatársa egyetemi magántanár a Szegedi Tudományegyetemen, földtudományi szakon, valamint az ELTE TTK Földtudományi Doktori Iskolájának akkreditált tagja. Hét kutató vesz részt az egyetemi alapképezésben az Eötvös Loránd Tudományegyetemen, a Szegedi Tudományegyetemen, a Pécsi Tudományegyetemen, a Nyugat-Magyarországi Egyetemen valamint a Képzőművészeti Egyetemen. Három munkatárs témavezetőként irányította PhD-hallgatók doktori értekezésének elkészítését az Eötvös Loránd Tudományegyetem, illetve a Szegedi Tudományegyetem Doktori Iskolája keretében.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A beszámolási évben a GKKI kutatói 8 OTKA pályázatban voltak témavezetők, háromban szerepeltek alvállalkozóként és további kettőben résztvevőként. A beszámolási évben két új intézeti vezetésű OTKA kutatás indult. 2007. szeptember 30.-ig 1 fő minősített fiatal kutató foglalkoztatása OTKA posztdoktori pályázat keretében történt, ami nagyban hozzájárult fizetésének és kutatásainak anyagi fedezéséhez.

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

1. Arkai P, Sassi FP, Desmons J: Very low- to low-grade metamorphic rocks. In: Metamorphic Rocks: A Classification and Glossary of Terms: Recommendations of the International Union of Geological Sciences Subcommission on the Systematics of Metamorphic Rocks. (Eds., D Fettes D Desmons J). Cambridge University Press, Cambridge, UK, pp 36–42 (2007)

2. Haas J, Demény A, Hips K, Zajzon N, Weiszbürg TG, Sudar M, Pálffy J: Biotic and environmental changes in the Permian–Triassic boundary interval recorded on a western Tethyan ramp in the Bükk Mountains, Hungary. *Global and Planetary Change*, 55, 136–154. (2007)
3. Kreiter A, Bajnóczi B, Sipos P, Szakmány Gy, Tóth M: Archaeometric examination of Early and Middle Bronze Age ceramics from Százhalombatta-Földvár, Hungary. *Archeometriai Műhely* (2): 33–47 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Geokémiai Kutatóintézet

Átlagléttség <sup>1</sup> :	31	Ebből kutató <sup>2</sup> :	18
PhD, kandidátus:	9	MTA doktora:	2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
			10
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			32
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			31
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	15
nemzetközi együttműködés keretében:	15	SCI által regisztrált folyóiratban:	15
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	38,347	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	347
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			270
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	14	posztterek száma:	22
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	2	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	12	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	6
			216
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			129,8 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	3	Teljes saját bevétel:	41,7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			9
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			25
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30,8 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## IZOTÓPKUTATÓ INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29–33., 1525 Budapest, Pf. 77.  
Telefon: (36-1) 392–2531, Fax: (36-1) 392–2533  
e-mail: wojn@iki.kfki.hu, www.iki.kfki.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2006. évi terve a fő kutatási és fejlesztési feladatokat négy csoportba foglalta.

*Nukleáris analitikai módszerek alkalmazása és továbbfejlesztése.* FP6-os EU projekt keretében a prompt gamma aktivációs analitika (PGAA) módszerének alkalmazására épülő interdiszciplináris kutatások folytatása. Egy további, nagyaktivitású nukleáris hulladékok elhelyezését elősegítő FP6 program végrehajtása során geológiai minták vizsgálata, a nukleáris anyagok és izotópjuk kimutatása és mennyiségeik meghatározása.

*A nemzetközi nukleáris biztosítéki egyezmény garanciális (safeguards) követelményeinek érvényesítését célzó módszerek tökéletesítése, teljesítőképességük növelése és alkalmazásuk.* Urán és transzuránok meghatározása. Sérült nukleáris üzemanyagot tartalmazó tokok hasadóanyag tartalmának meghatározása.

*Sugárzások hatásának vizsgálata, sugárdozimetria* terén. Programozható tulajdonságú polimerek előállítási módszereinek fejlesztése, és szennyvizekben előforduló káros hatású nagy molekulák sugárzásos hatástalanítása. Sugárdozimetriai módszerek kifejlesztése környezetvédelmi, valamint sugártechnológiai célokra.

*Anyagtudományi-technológiai eljárások, katalizátorok, katalitikus folyamatok* vizsgálata terén az energia ellátással, tüzelőanyag cellákkal kapcsolatos célzott alapkutatások, különös tekintettel a preferenciális szén-monoxid oxidáció (PROX), illetve általában a szén-monoxid oxidáció katalizátorai (különös tekintettel az arany tartalmúakra) hatásának és tulajdonságainak vizsgálatára.

Folyamatos, az intézet Alapító Okiratában rögzített feladat az Országos Atomenergia Hivatal (OAH) hatósági tevékenységének műszaki háttérül szolgáló egyes célfeladatok teljesítése, az országos sugárzóanyag- és nukleáris anyag-nyilvántartás, az ellenőrző módszerek fejlesztése. Kiemelkedő fontosságú, a 2008. évben is folytatódó feladat volt a paksi erőmű tokozott hulladékai nukleáris anyagtartalmának meghatározása. A helyszíni mérések nagyrészt befejeződtek, a munka a mérési adatok kiértékelésével folytatódik.

Az intézet publikációs tevékenységét jellemző számszerű adatok bizonyos emelkedést mutatnak a 2006. évi adatokhoz képest. Az intézet kutató és oktató tevékenységének elismerését is mutatja, hogy egy vezető kutatót a Magyar Tudományos Akadémia Eötvös Koszorúval tüntette ki, egy másik kutatónak a Pannon Egyetem díszdoktori címet adományozott.

Az intézet működésének forrásai végeredményben – feszültségektől nem mentesen – biztosíthatók voltak. Megoszlásuk (%-ban): MTA 56,8; Pályázatok 13,3; OAH megbízás: 5,0; Vállalati megbízás 12,2; Egyéb 12,7.

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

*A nukleáris analitikai módszerek alkalmazása és továbbfejlesztése (célzott alap kutatás, kísérleti fejlesztés) terén:*

A Prompt gamma aktivációs analízis (PGAA) módszerrel végzett mérések hozzájárultak egy, az Észak-Amerikai kontinensen történt, súlyos következményekkel járó, 13900 évvel ezelőtti kozmikus eredetű katasztrófa – meteor becsapódás – tényének bizonyításához.

A PGAA-t eredményesen alkalmazták nukleáris folyamatok, anyagtudományi, geológiai (bór koncentráció meghatározása különböző kőzetekben) és archeometriai vizsgálatokban.

Kidolgozták és elsőként alkalmazták az in situ PGAA technikát hidrogén tartalom változásának követésére fémkatalizátorokban.

A PGAA technika és a neutrontomográfia kombinálásával háromdimenziós képalkotó eljárást fejlesztettek ki. Sikeres összehasonlító és kiegészítő vizsgálatokat végeztek más technikákkal is (pl. neutron diffrakció, XRF, ICP-MS).

*Kutatói ráfordítás: 20 fő, ebből intézeti állományban van: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 18 M Ft, ebből pályázati forrás: 10 M Ft.*

A nagy aktivitású radioaktív hulladékok, kiégett fűtőelemek végleges elhelyezése érdekében a Bodai Aleurolit Formációból származó kőzetmintákat vizsgáltak

Mössbauer spektroszkópia módszerével megállapították, hogy e geológiai mintákban a vas hematit és klorit ásványi összetevőkben található. Megállapították, hogy az üledék kőzetté alakulásának folyamatában lejátszódó oxidációs-redukációs folyamatok mértékéről a  $Fe^{2+}/Fe^{3+}$  ionarány hasznos információt szolgáltat.

Meghatározták  $^{99}Tc$  és  $^{14}C$  radioizotópok effektív diffúziós állandóit közepesen mély fúrásból származó mintákon és megállapították, hogy a migráció mértéke a mély fúrásokból származó minták esetében mért értékekéhez hasonló. A mérések alapján megállapították, hogy e radioizotópok migrációs távolsága (a terjedés mértéke) tízezer év alatt méteres nagyságrendű.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,5 M Ft.*

*Nukleáris anyagok és izotópjaik kimutatási módszereinek fejlesztése és alkalmazásuk (alkalmazott kutatás, kísérleti fejlesztés, gyakorlati alkalmazás) terén:*

- Impulzussorozat-rögzítő eszközt fejlesztettek ki neutron koincidencia mérő berendezésekhez, amely jelenleg 1,4 millió cps sebesség rögzítésre és kiértékelésre alkalmas.
- Olyan (interrogációs) módszert dolgoztak ki erősen dúsított U-minták kimutatására, amelyet nem gátol a  $\leq 14$  mm vastagságú ólom-árnyékolás.

Lézerabláció – ICP –MS kombinált alkalmazására épülő, az eddig használt eljárásoknál lényegesen gyorsabb módszert dolgoztak ki kis gyakoriságú hasadóanyag nyomszennyező (Pu) kimutatására és urán-oxid üzemanyag tabletták gyártási időpontjának meghatározására.



A környezetben igen kis mennyiségben előforduló urán és transzurán elemek (Pu, Am) meghatározására alkalmas módszereket dolgoztak ki, amelyekkel lehetőség van a szennyezések eredetének megközelítő pontosságú meghatározására. Ez módot ad a reaktoreredetű szennyezés megkülönböztetésére az atomfegyver kísérletből származótól, és az utóbbi időpontjának meghatározására (új keletű vagy az „atomcsend egyezmény” előtti kísérlet). E módszerek részben a környezet ellenőrzésére, részben az „atomsorompó egyezmény” (NPT) kiegészítő jegyzőkönyvében előírt környezeti mintaellenőrzés céljára alkalmazhatók. A módszereket sikerrel alkalmazták hazai és más európai környezeti minták elemzésére.

Analitikai eljárásokat fejlesztettek ki (ICP-SFMS) élelmiszerek eredetének meghatározására.

A Paksi Atomerőműben sérült üzemanyag-kazetták szerkezeti elemeit tartalmazó tartályok (12 db) hasadóanyag mentességét verifikálták és sérült üzemanyagot tartalmazó tokok (37 tok) hasadóanyag tartalmát határozták meg.

Az urántartalmú anyagok korának meghatározására kifejlesztett roncsolás-mentes módszereket kiterjesztették kisebb dúsítású uránt tartalmazó minták korának meghatározására.

E kutatások társadalmi haszna a nukleáris anyagok illegális forgalma elleni védekezés megerősítésében, valamint a környezeti szennyezések gyors kimutathatósága révén a lakosság biztonságának növelésében nyilvánul meg.

*Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban van: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 24 M Ft.*

*Sugárzások hatásainak vizsgálata, dozimetria (célzott alapkutatás, kísérleti fejlesztés)*

Új eredményeket értek el a sugárzásos szennyvíztisztítás (várhatóan nagy gyakorlati jelentőségűvé váló) témakörében. Aromás származékok, köztük peszticidek, (poliklórbenzol) degradációját vizsgálták. A molekulaszervezet és a reaktivitás közötti összefüggés tanulmányozása céljából kvantummechanikai számításokat is felhasználva megállapításokat tettek az azo-hidrazo tautomerizáció mechanizmusára, meghatározták a gyökök reakcióképes helyeit (támadáspontjait).

Funkcionális polimer monolitokat állítottak elő. Két monomerből készített polimerek előállításának körülményeit (monomerarány, besugárzási hőmérséklet, dózis, dózisteljesítés) optimalizálták, a különböző tényezők pórusszerkezetre kifejtett hatása alapján. Az előállított monolitok tesztelésével bizonyították azok alkalmasságát HPLC-s kolonnaként proteinek és nukleinsavak elválasztására.

*Kutatói ráfordítás: 8 fő, ebből intézeti állományban van: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft*

Sugártechnológiai célú dozimetria fejlesztése során befejezték tetralóziium ibolya sót tartalmazó vizes és alkoholos doziméter oldatok radiolízise mechanizmusának vizsgálatát. Igazolták tetrazólium sót tartalmazó filmek alkalmazhatóságát technológiai folyamatok ellenőrzésére, ipari gamma besugárzóknál és elektrongyorsító berendezéseknél.

Kevert neutron-gamma térben (reaktor termikus csatornájában) történt vizsgálataik során megállapították, hogy a LTB, illetve a LTB:Cu dózismérő együtt, párban igen alkalmas

neutron, illetve gamma dozimetriai célra. Kimutatták, hogy mind a LTB, mind a LTB:Cu fényérzékenysége elhanyagolható.

Környezeti dozimetriai vizsgálatokat végeztek a KFKI területén az AEKI és az IKI által használt passzív TL ( $\text{Al}_2\text{O}_3\text{:C}$  és  $\text{CaSO}_4\text{:Tm}$ ) dózismérő rendszerekkel. Megállapították, hogy a passzív dózismérőkkel kapott eredmények összhangban vannak az aktív módszerekkel mért dózis értékekkel.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft*

#### *Katalizátorok és katalitikus folyamatok vizsgálata terén*

A CO oxidáció és PROX (CO preferenciális oxidációja hidrogén jelenlétében) kutatása (célzott alapkutatás) során arany, valamint platina és palládium tartalmú katalizátor rendszereket vizsgáltak.

Au-CeO<sub>2</sub> rendszerek esetében megállapították a CeO<sub>2</sub>-al dekorált Au/SiO<sub>2</sub> minták CO oxidációban lényegesen nagyobb aktivitásúak, mint az analóg Au/CeO<sub>2</sub> rendszer. A néhány nanométeres kristályos, illetve részben amorf CeO<sub>2</sub> Au-val alkotott határfelületének aktivitása megnő. Nagy feleslegű hidrogénben azonban az Au-CeO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> aktivitása és szelektivitása is kisebb, mint az analóg Au/CeO<sub>2</sub>-é.

Au tartalmú TiO<sub>2</sub>, La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>, MgO, CeO<sub>2</sub>, együtt leválasztott Ce-Ti-oxid, Ce-Zr-oxid, Ce-Cu-oxid és Mn-oxid hordozós katalizátor rendszerek összehasonlító vizsgálata alapján megállapították: a legjobb tulajdonságú Mn-oxid, Ce-Cu-oxid hordozós rendszerekkel közel 100%-os CO átalakulás érhető el. Kisebb Au részecskék alkalmazása általában csökkenti az adott konverzió eléréséhez szükséges hőmérsékletet, azonban az elérhető maximális CO konverziót és az ahhoz tartozó szelektivitást nem befolyásolja jelentősen. 2,5–10% La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> felvitele a TiO<sub>2</sub>-re csökkenti az Au szemcseméretét, növeli a termikus stabilitását és az oxidációs aktivitást.

Az előállítási körülmények jelentős mértékben befolyásolják Au-TiO<sub>2</sub> nanoszerkezetek, aktív határfelületek kialakulását mezopórusos SBA-15 hordozóban, amit a preparálás során fellépő elektrosztatikus kölcsönhatásokkal értelmeztek.

Palládium és platina alapú katalitikus rendszerek vizsgálata során az O<sub>2</sub>/CO parciális nyomás arány Pt/CeO<sub>2</sub> katalizátorokra kifejtett hatásáról megállapították (in situ XPS és DRIFT spektroszkópiával): az O<sub>2</sub>/CO arány befolyásolja a felületi formát és karbonát specieszek közötti átalakulást, tehát ezek jelenléte, aránya és a reakció sebessége között közvetlen összefüggés nem állapítható meg. Pozitív korreláció mutatható ki a hordozó felületén megjelenő oxigén-vakanciák mennyisége, ill. a hidratáltság mértéke és a reakciósebesség között, ami a katalizátor és a vizsgált reakció közötti adaptív kölcsönhatásra utal a Pd/CeO<sub>2</sub> kevésbé szelektív a PROX reakcióban mint a Pt/CeO<sub>2</sub>. E jelenség következő okait állapították meg: Pd-hidrid képződése, a Pd-oxid nagyobb stabilitása, valamint a CO kisebb mértékű adszorpciója, cérium-oxid hidratálódás és oxigén-vakancia képződés a hordozós Pd esetén.

A WGS és PROX reakciók összehasonlítása alapján megállapították, hogy Pt/CeO<sub>2</sub> katalizátorokon mindkét reakció lefutása értelmezhető formát köztitermék képződéssel. A PROX alacsonyabb hőmérsékleten (340–360 °K), Ce<sup>4+</sup> állapot mellett, míg a WGS a magasabb hőmérsékleten (423–573 °K) és Ce<sup>3+</sup> oxid egyidejű jelenlétében játszódik le. A

körülmények megfelelő választásával érhető el, hogy a két, gyakorlati szempontból egyaránt fontos reakció közül a kívánt reakció legyen a domináns.

*Kutatói ráfordítás: 10 fő, ebből intézeti állományban van: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 28 M Ft, ebből pályázati forrás: 4,1 M Ft*

*Kétfémes katalizátorokon lejátszódó szénhidrogén reakciók vizsgálata (tisztá és célzott alapkutatás)*

Elektrokémiai módszerrel készült, PtRh/SiO<sub>2</sub> és fém PtRh-on (kis Rh:Pt arány), tanulmányozták a két, katalitikusan aktív fém közötti szinergikus hatásokat a metilciklopentán átalakulásában. A fő reakció a gyűrű felnyílása, amit magasabb hőmérsékleten töredékeket eredményező további C–C kötéshasadás is kísér. A főtermékek (gyűrűnyílás, benzol, töredékek) szelektivitását illetően a PtRh inkább a Pt-hoz, míg a gyűrűnyílás termékeloszlása közelebb áll (az aktívabb) Rh-on észlelthez.

Ge adalék hatásait tanulmányozták elektrokémiai módszerrel készült hordozós és hordozómentes Pt-Ge katalizátorokon. A PtGe-SiO<sub>2</sub> katalizátor kevésbé volt aktív mind hexán, mind metilciklopentán reakcióiban, mint a Pt/SiO<sub>2</sub>. Csökkent a telített termékek szelektivitása, míg a benzolé megnőtt. Hordozómentes PtGe aktívabbnak bizonyult, mint a fém platina Fémorganikus ojtással készült PtGe-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátorokon megfigyelték, hogy a katalitikus hatás optimálható a Ge adalék koncentrációjának függvényében.

Au nanorészecskéken Pd nanoszerkezeteket szintetizáltak Pd<sup>2+</sup> impulzus radiolízisével és alkoholos redukációjával. Megállapították, hogy a Pd-Au aggregátumok kiemelkedő aktivitásúak az 1,3-ciklooktadién folyadékfázisú szelektív hidrogénezésében.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 6,4 M Ft; ebből pályázati forrás 0 M Ft*

Környezeti katalízis, metán aktiválás (célzott alapkutatás) terén gallium ioncserével módosított H-ZSM-5 impregnálásával olyan M/Ga/H-ZSM-5 (M:Fe, Mo illetve Co) katalizátorokat sikerült kifejleszteni, amelyek az N<sub>2</sub>O/CH<sub>4</sub> gázelegyek reakcióiban a folyamat közismerten legjobb Fe/H-ZSM-5 katalizátoránál jelentősen aktívabbnak, Fe és Mo esetén 160 °C-kal csökkentik az 50%-os konverzió hőmérsékletét. Megállapították, hogy az impregnálással hozzáadott fém (Fe, Co, Mo) hatására a H-ZSM-5, valamint a Ga/H-ZSM-5 szerkezetében az erős savas centrumok erős redox centrumokká alakulnak.

Megállapították, hogy a tiofén hidrodészulfurálása során keletkező szénhidrogének (butadién) és a kénezett katalizátor között kölcsönhatás lép fel. Ez okozza – az irodalom által eddig cáfolt – kén-cserét a tiofén és a katalizátor kénje között.

*Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10,4 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft*

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

Az intézet tudományos osztályainak mindegyike rendszeres tudományos kapcsolatot tart fenn hazai kutatóintézetekkel, egyetemi tanszékekkel és több vállalattal.

A kutatóintézetek közül az MTA KK, a Magyar Állami Földtani Intézet, a csillebérci telephelyen működő négy intézet a legfontosabb együttműködő partnerek. Külön kiemelés érdemel a kutatás és oktatás terén az együttműködés a Pannon Egyetemmel, különös tekintettel arra, hogy jelenleg egyedül ezen az egyetemen folyik radiokémikus képzés. Együttműködési keret megállapodás kötésére is sor került az intézet és a Pannon Egyetem között. Kutatási együttműködés folyik ezen kívül a BMGE, az ELTE, SzTE több tanszékével és a Magyar Nemzeti Múzeummal. A vállalatok és az intézet közötti együttműködés terén külön is említést érdemel a Paksi Atomerőmű és a Mecsekérc Zrt.

A közös tudományos témák kutatására irányuló együttműködésben jelentős szerepet játszanak az intézet által működtetett vizsgálati módszerek, a PGAA, ICP-MS, Mössbauer- és fotoelektron spektroszkópia, valamint az izotóp mérés technika alkalmazása. A tudományos együttműködés mértékét jellemzi, hogy az intézet munkatársai által 2007-ben tudományos folyóiratban megjelentetett publikációk több mint 40 százalékának volt(ak) társszerző(i) más hazai kutatóhelyek munkatársai.

Az intézet tudományos kapcsolatai között kiemelkedő szerepet játszik az együttműködés az Országos Atomenergia Hivatallal, amely jelentős számban rendszeresen jelöl ki tudományos alapú fejlesztési feladatokat elsősorban a nukleáris biztonság ellenőrzése terén. A II. fejezetben ismertetett több eredmény (például csekély dúsítású uránt tartalmazó anyagok korának meghatározása, célhardver és szoftver készítése neutron-koincidencia mérések digitális rögzítésére) az OAH-tól kapott kutatási megbízás keretében született.

Az intézet nemzetközi (két és többoldalú) kapcsolatai kevés kivétellel az IKI kutatási témaköreinek mindegyikére kiterjednek, mintegy 50 együttműködő partnert érintenek. Központi szerepet játszanak az EU programok – a nukleáris és egyes katalízis-kutatások, fejlesztések és különböző laboratóriumokban végzett nemzetközi összehasonlító vizsgálatok a NAÜ keretében, ill. szervezésében. Nagyszámú TÉT és több akadémiai közötti együttműködés is szerepel a kooperációs formák között. Az együttműködő partnerek között jelentős számban szerepelnek világszerte ismert, elismert intézmények: 2 francia nukleáris kutatóintézet (Grenoble és Cadarache) a Lawrence Berkeley Nat. Laboratory (USA), a dubnai Egyesült Atomkutató, Az EU ITV, Max Planck Társaság berlini Fritz Haber intézete. Ennek egyik volt igazgatója, Gerhard Ertl professzor nyerte el a 2007. évi kémiai Nobel-díjat felületkémiai kutatásaiért, 6 dolgozatának az IKI egy vezető kutatója is társszerzője volt; melyek egyikét idézték [Appl. Surf. Sci. 8 (1981) 373] a Díj indokolásában is.

A PGAA kutatások révén az IKI nemzetközi interdiszciplináris program része lett, nukleáris biztonsági és egyéb nukleáris kutatásai a NAÜ hivatalos kiadványainak és programjainak lettek állandó részesei. Gyakorlattá vált, hogy egyes francia egyetemi hallgatók (Poitiers) az intézet katalízis laboratóriumában készítik szakdolgozatuk egy részét.

A nemzetközi tudományos együttműködés érdemi voltát, eredményességét bizonyítja, hogy a 2007-ben külföldi társszerzőkkel közös publikációk száma elérte az összes intézeti publikáció 50%-át.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

Az IKI PGAA kutatásainak három fő iránya az interdiszciplináris- (archeometria, geológia, kémia és anyagtudományok) és a nukleáris alkalmazások (hatáskeresztmetszetek, magadatok

és kalibrációs adatok pontosítása), valamint módszer- és berendezés fejlesztés. Kutatásait a NAP VENEUS05 pályázat támogatja, amelynek része a kutatóberendezésük és a hozzá tartozó infrastruktúra felújítása részben önerőből (2007-ben 6 M Ft). Az elnöki keretet (1,7 M Ft) a spektrométerük adatgyűjtő részének felújítására és a hatékonyságát jelentősen növelő mintaváltó megterveztetésére költötték. Az átalakítások eredményeképpen a neutronfluxus több mint négyszeresére nőtt, új detektort és adatgyűjtő rendszert helyeztek üzembe. Az új rendszerrel folytatott archeometriai, nukleáris technológiai és PGAA metodika fejlesztésére irányuló vizsgálatok várhatóan 2008-ban kiváló eredménnyel zárulnak.

Az IKI jelenleg több az EU-nál és a NAÜ-nél elnyert pályázat keretében végez kutató-fejlesztő tevékenységet. Kiemelkedő a nagyszámú EU partnerrel folyó ANCIENT CHARM FP6 projekt, amelynek keretében jelentős mértékben fejlesztették a PGAA technikát, összekapcsolva azt más neutron technikákkal. A kutatás célja a kulturális örökség vizsgálatában és archeológiai kutatásokban használt módszerek fejlesztése. Az eredmények egy része a II. fejezetben ismertetésre került. Jelentős előrelépés történt 2007-ben a projekt céljainak elérésében, különösen a PGAA és a neutron tomográfia összekapcsolása tekintetében, a már említett 3-dimenziós képalkotás kimunkálásával.

Megkezdődött a 2006–2010 időszakra szóló EFNUDAT EU (Euratom) program szervezése, a nemzetközi résztvevők, felhasználók adatainak gyűjtése, az összehasonlító méréseket végzők kiválasztása.

Folytatódott az IKI tevékenysége a 2005-ben indult FUNMIG-IP 516514 (Fundamental Processes of Radionuclide Migration) projekt keretében a II. pontban már leírt, Bodai Aleurolit Formációval kapcsolatos izotóp migrációs (retenciós) jellemzőik értékelésével.

Az IKI részt vesz egy újabb, izotópmigrációs témakörrel kapcsolatos (32 résztvevős) projektben is: EU-FP7 EURATOM (Fission) 212287 CP, amely a kiegészített atomerőművi fűtőelemek tényleges geológiai elhelyezését kapcsolatos. A vizsgálatok a migráció során lejátszódó redox folyamatok szerepének tisztázására irányulnak. Ezek a mérések is az említett geológiai formációból származó minták tulajdonságainak tisztázására irányulnak.

Az IKI (Felületkémiai és Katalizátorkutató O.) kutatói részt vesznek egy 2007-ben indult „Nagy aktivitású és szelektivitású katalizátorok kialakítása egy- és kétfémes nanorészecskék felületi funkcionálásával, a promoteáló és/vagy szinergikus hatások megértése” témájú COST projektben (D36/0003/06). Ennek keretében a preparálási körülmények hatásáról Au-TiO<sub>2</sub> nanoszerkezetek kialakulására mezopórusos SiO<sub>2</sub> hordozóban és Au nanorészecskéken impulzus radiolízissel és alkoholos redukcióval szintetizált Pd nanoszerkezetek 1,3-ciklohexadién szelektív hidrogénezésben mutatott kiemelkedő aktivitásról számoltak be.

2007-ben elfogadásra került a „Nagy aktivitású, stabil nanoszerkezetű katalizátorok kifejlesztése metán széndioxidos 'száraz' reformálásához” című EU-projekt („Erachemistry”), amelyben az IKI egy ír és egy francia partner-intézménnyel együtt vesz részt. A program keretében a folyamatra jellemző, a katalizátort mérgező szénlerakódás mértékének csökkentése a cél a szénképződés visszaszorításával és a felületi szén és széndioxid reakciójának elősegítésével. A kutatások a hordozó módosításával, kétfémes rendszerek, különböző preparálási módszerek alkalmazásával széntűró katalizátor - család kifejlesztésére irányulnak.

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

1. Varga Zs: Origin and release date assessment of environmental plutonium by isotopic composition. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 389: 725–732 (2007)
2. Lakosi L, Nguyen CT: Gamma and fast neutron radiation monitoring inside spent reactor fuel assemblies. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment* 580: 788–791 (2007)
3. Hlavathy Z, Tétényi P: Formation of Surface Adspecies at Furan and Tetrahydrofuran Adsorption on the Pt Surface Studied by Work Funktion Changes and Auger Electron spectroscopy. *Surface Science* 601: 2026–2031 (2007)
4. Firestone RB, West A, Kennett JP, Becker L, Révay Zs, Belgya T, et al. (20): Evidence for an extraterrestrial impact 12,900 years ago that contributed to the megafaunal extinctions and the Younger Dryas cooling. *PNAS* 104: 41: pp. 16016–16021 (2007)
5. Pálfi T, Takács E, Wojnárovits L: Degradation of H-acid and its Derivative in Aqueous Solution by Ionising Radiation. *Water Research* 41: 2533–2540 (2007)
6. Beiler B, Vincze Á, Svec F, Sáfrány Á: Poly(2-hydroxyethyl acrylate-co-ethyleneglycol dimethacrylate) Monoliths Synthesized by Radiation Polymerization in a Mold. *Polymer* 48: 3033–3040 (2007)
7. Pozdnyakova-Tellinger O, Teschner D, Kröhnert J, Jentoft FC, Knop-Gericke A, Wootsch A, et al.(1): Surface water-assisted preferential CO oxidation on Pt/CeO<sub>2</sub> catalyst. *Journal of Physical Chemistry* 111: 5426–5431 (2007)
8. Györffy N, Wootsch A, Szabó S, Bakos I, Tóth L, Paál Z: Reactions of methylcyclopentane on Rh-Pt catalyst prepared by underpotential deposition of Rh on Pt/SiO<sub>2</sub>. *Topics in Catalysis* 46: 1-2, pp. 57–64 (2007)
9. Sárkány A., Hargittai, Horváth A: Controlled synthesis of PDDA stabilized Au-Pd bimetallic nanostructures and their activity in hydrogenation of acetylene. *Topics in Catalysis* 46: 1-2, pp. 121–125 (2007)
10. Beck A, Horváth A, Schay Z, Stefler Zs, Koppány Zs, Guczi L, et al.(2): Sol derived gold-palladium bimetallic nanoparticles on TiO<sub>2</sub>: structure and catalytic activity in CO oxidation. *Topics in Catalysis* 44: 1-2 pp. 115–121 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Izotópkutató Intézet

Átlagléttség <sup>1</sup> :	92	Ebből kutató <sup>2</sup> :	44
PhD, kandidátus:	27	MTA doktora:	10
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
			20
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			88
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			82
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	79
nemzetközi együttműködés keretében:	42	SCI által regisztrált folyóiratban:	79
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	115	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	552
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			450
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	1	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	2	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	28	posztterek száma:	35
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	2	Doktori iskolát vezetőik száma:	2
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	2	Gyakorlati kurzusok száma:	2
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	1
		PhD-t:	8
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			60
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			361 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	4	Teljes saját bevétel:	409 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			10
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	17 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	72,5 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	26 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			18
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	108 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			2,5 MFt

## KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59–67, 1525 Budapest, Pf. 17.

Telefon: 438–1111, Fax: 438–1143

e-mail: palg@chemres.hu, honlap: <http://www.chemres.hu>

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóközpont alapvető missziója, hogy a kémia és a vele rokon tudományágak (elsősorban az élettudományok, az anyagtudomány, a környezettudományok és a nanotudományok) fontos területein olyan nemzetközi színvonalú tudományos kutatásokat folytasson, amelyek nagyobb létszámú kutatócsoportok összehangolt tevékenységét és korszerű nagyműszeres módszerek koordinált alkalmazását igénylik.

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

A központ tevékenységében lényeges szerepük van a hazai, ill. az európai iparvállalatokat segítő, a versenyképesség fokozását, korszerű termékek és eljárások kidolgozását szolgáló kutatási programoknak. Ebből a szempontból kiemelkedő jelentősége volt a „Kémia az életminőség javításáért” c. (GVOP) koordinációs kutatóközponti pályázat feladatai 2007. évi teljesítésének. Az NKTH, ill. NFT-által támogatott több programban is részt vesznek a Központ kutatói. Ezeknek a programoknak az eredményei jelentősen hozzájárulnak az ország gazdasági stabilizációjához, valamint az akadémiai-egyetemi kutatóhelyeknek a vállalati kutatási-fejlesztési programokba való bevonásához. A kitűzött célok elérését jelentős mértékben segítette az EU kutatási programokban való aktív részvétel is.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2007. évi tudományos kutatásait a *funkcionális anyagok kémiai kutatása*, előállításuknak, szerkezetüknek és tulajdonságaiknak vizsgálata foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

- Biomolekuláris és szerves kémiai kutatások, különös tekintettel a biomakromolekulák élettani szerepére, új gyógyszer-hatóanyagok, diagnosztikumok kidolgozására,
- Felületkémiai és katalíziskutatások, különös tekintettel a nanotudományi és nanotechnológiai kutatásokra, illetve alkalmazásokra,
- Szerkezeti kémiai kutatások, különös tekintettel a szupramolekuláris anyagok tanulmányozására és új szerkezetkutatási módszerek bevezetésére,
- Anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások, különös tekintettel új, funkcionális anyagok előállítására, környezetbarát eljárások kidolgozására és a hulladékok hasznosítására.



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	376	Ebből kutató <sup>2</sup> :	215
PhD, kandidátus:	71	MTA doktora:	41
		levelező tag:	1
		rendes tag:	7
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			84
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			315
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			310
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	199
nemzetközi együttműködés keretében:	114	SCI által regisztrált folyóiratban:	199
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	493,09	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	4035
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			3118
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	8
		jegyzet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	43
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	12	MTA doktora:	2
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	165	posztterek száma:	160
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	36	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	39
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			61
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	15	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	64	Gyakorlati kurzusok száma:	33
TDK munkát készítő hallgatók száma:	21	Diplomamunkát:	21
		PhD-t:	68
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			3561
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			1650,6 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	19	Teljes saját bevétel:	1446,4 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			13,6 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			50
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	127,3 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			32
NKFP:	17	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	619,7 MFt
Egyéb:	15	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	17 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	8	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	258 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			15
EU forrásból:	8	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	23,6 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5,8 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			105
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	381,2 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

**Kémiai Kutatóközpont**  
**BIOMOLEKULÁRIS KÉMIAI INTÉZET**  
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59–67; 1525 Budapest, Pf. 17.  
Telefon: 438–1110, Fax: 438–1145  
e-mail: ghajos@chemres.hu, honlap: www.chemres.hu

### **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

A kutatóhely alapvető feladata volt 2007. évben is, mint korábban, hogy nemzetközi színvonalú tudományos kutatásokat folytasson 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 még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése.

Az intézet fontos kötelezettségei közé tartozott 2007. évben mind a hazai, mind az európai kutatási pályázatok időszerű feladatainak teljesítése.

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

#### *Szintetikus szerves kémiai kutatások*

Újabb, palládium-katalizált keresztkapcsolások végrehajtásával indollal kondenzált származékokat szintetizáltak, melyeknek multidrog-rezisztenciára gyakorolt hatását kooperációban kutatták. A rezisztenciagátlás vizsgálata az életminőség javítása szempontjából a gyógyszerkutatás egyik kiemelt területe napjainkban.

Ikerionos vegyületek tanulmányozásakor váz-átrendeződéseket figyeltek meg. A tapasztalt átalakulások megismerése lényeges szerepet játszott a vegyülettípusok reakciókészségének értelmezésében.

Több olyan gyűrűzárási módszert dolgoztak ki, amelyek kondenzált pirazolokat eredményeztek. Az új gyűrűrendszerek szintézise alapvető jelentőségű a gyógyszerkémiaiban, mivel új gyógyhatású származékok felismerésének fontos lehetőségét jelenti.

*Kutatói kapacitás: 6 fő, ebből intézeti állományban: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.*

A bifunkcionális, kinin-alapú organokatalizátorok alkalmazásának, valamint szerkezetének vizsgálata c. témában olyan új fázisjelölési technikát dolgoztak ki, amely a lehető legkisebb fluoros fázisjelölő csoportot, a trifluorometil-csoportot alkalmazza. A kidolgozott eljárást mind az organokatalizátorok visszaforgatásánál, mind a foszfinok szelektív kinyerésénél alkalmazták.

*Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 36 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.*

### *Természetes szerves anyagok szintézise*

Eljárást dolgoztak ki a D-gyűrűben 5 szénatomot tartalmazó D-nor-ergolinváz kialakítására, s ennek hasznosításával előállították az eddigi egyetlen szintetikus elő nem állított klavin-alkaloidot, a cikloklavint.

(±)-Piperidin-2-karbonsavból kiindulva iparilag is hasznosítható eljárást dolgoztak ki (R)- és (S)-pipekolsav származékok előállítására, amelyek fontos kiindulási alapanyagai alkaloidok és más biológiailag aktív vegyületek szintézisének.

(±)-Piperidin-2-karbonsavból kiindulva előállították egy béka (±)-epiquinamid elnevezésű alkaloidját, majd egy speciális királis katalizátor (CBS) alkalmazásával kidolgozták a természetes izomernek, s valamennyi lehetséges királis diasztereomerjének szintézisét.

*Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft.*

### *Biológiai kémiai kutatások*

A glikopeptidok kulcsszerepet töltenek be a sejt felismerési folyamatokban. Kisebb molekulatömegű glikopeptidok szintézisére és gyógyszerként történő felhasználására számos sikeres próbálkozás történt. Az elmúlt évben az anomer pozícióban formilcsoportot tartalmazó C-glikozidokat, majd e vegyületekből Strecker-reakcióban nyerhető glikoaminosav építőelemeket állítottak elő. Ezekből a vegyületekből szilárd fázisú peptidszintézissel módosított szerkezetű, biológiailag aktív peptidok nyerhetők.

Formil-C-glikozidokból aszimmetrikus Strecker-reakcióban, aceton-ciánhidrin cianid-donor és S(-)-1-feniletamin, mint királis induktor jelenlétében, diasztereomer aminonitrileket állítottak elő.

*Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: –*

### *Nukleotidkémiai és peptidkémiai kutatások*

Egy, a GVOP által támogatott, hazai konzorciumi együttműködés keretében uracil-tartalmú oligonukleotidokat szintetizáltak. Ezek egy része az uracil-DNS-endonukleáz enzim affinitás-kromatográfiai tisztítása céljából olyan szerkezeti elemeket (3'-biotin, 5'-aminohexil csoport) tartalmaz, amelyek lehetővé teszik a megfelelő szilárd hordozóhoz történő kötést. Másrészt a BRCA1 mellrák gén bizonyos mutációinak kimutatására szolgáló, kettősen jelzett (5'-fluorescein, 3'-BHQ-1) oligonukleotidokat (molekuláris jelzők) is szintetizáltak a kontrollkísérletekhez szükséges komplementer szálakkal együtt.

Olcsó alapanyagokból, L-arabinózból, ill. D-galaktózból kiindulva, új, 2'-módosított L-ribo- és L-arabino-nukleozidok szintéziséhez felhasználható szénhidrát komponenseket állítottak elő. A cukor-, ill. bázisrészen módosított L-nukleozidok között számos, jelentős antivirális aktivitással rendelkező analogon található.

*Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.*

### *Szénhidrátkémiai kutatások*

A heparin szerkezet-hatás összefüggések vizsgálatával kapcsolatban olyan szintézisutat dolgoztak ki, mellyel mindössze négy ortogonálisan védett tetraszacharidból a heparin és heparán-szulfát összes lehetséges – több száz – tetraszacharid egysége előállítható. Ezeknek az oligoszacharidoknak a felhasználásával lehetőség nyílik a heparin különböző biológiai hatásainak szétválasztására, potenciálisan mellékhatás nélküli készítmények kifejlesztésére.

A glikózaminoglikán oligoszacharidok területén ugyancsak ortogonális védőcsoportok használatán alapuló szintézisstratégiát dolgoztak ki azacukor-tartalmú heparin oligoszacharid analógok előállítására. E vegyületek a heparin bioszintézisében szerepet játszó heparánáz enzim inhibitorai. A szintetizált, ortogonálisan védett azacukor-diszacharid nagyszámú heparánáz inhibitor előállítását teszi lehetővé.

Génterápiás célokra és a DermaVir AIDS-vakcina hatékonyságának növelésére, a DNS-nek dendritikus sejtekbe történő szelektív bejuttatását elősegítő vegyületeket terveztek és szintetizáltak. E célból megvalósították a dendritikus sejtek egy sejtfelületi receptora különböző oligoszacharid ligandumainak szintézisét és ezen oligoszacharidok polimer hordozókhoz történő konjugálását. Ezt a munkát nemzetközi együttműködés keretében, ipari partnerekkel végezték.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 20 M Ft.*

### *Neurokémiai kutatások*

Felismerték a glutaminsav gliális felvételével aktivált GABA-felszabadulással járó cserefolyamat minimális mechanizmusát. A mechanizmus ismerete a gyógyszertervezésben új stratégiát kínál a potenciálisan neuroprotektív hatású vegyületek tervezésében.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 18 M Ft.*

### *Molekulárfarmakológiai kutatások*

Spektroszkópiai és kromatográfiás technikákkal elsőként tanulmányozták egyes kinolin és akridin típusú maláriaellenes gyógyszerek plazmafehérje-kötődését. Kimutatták több vegyület nagy affinitású, egy esetben sztereoszelektív szérum-AGP kötődését; meghatározták a kötődési paramétereket, vizsgálták a vegyületek kötődési interakcióit. Becslést adtak a gyógyszerek albumin-kötődésének erősségére.

Rekombináns AGP preparátumok CD és UV/Vis spektroszkópiai vizsgálatával igazolták a fehérje központi üregében található triptofán oldallánc fontos szerepét gyógyszerek és egyéb ligandumok kötődésében. Feltárták a humán AGP és a membrántranszporter P-glikoprotein ligandumai és funkcionális sajátosságai közötti hasonlóságokat. Javaslatokat tettek ezek gyakorlati hasznosítására.

A natív AGP molekulavariánsainak elválasztását egy továbbfejlesztett, nagyobb felbontóképességű, kapilláris elektroforézis metodikával valósították meg különböző malignus elváltozásokban. Megállapították, hogy a savanyúbb AGP-molekulavariánsok mennyisége szignifikánsan nő tumoros betegekben.

Nemzetközi együttműködésben kifejlesztettek egy nanomólos affinitású, alegység-szelektív neuroszteroid antagonistát GABA<sub>A</sub> receptorokra. Előzőleg a neuroszteroid kötőhelyre csak mikromólos affinitású, nem-szelektív antagonistá volt ismeretes.

*Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft.*

#### *Farmakobiokémiai kutatások*

*In vitro* modellt állítottak be és azt validálták specifikus szubsztrátok felhasználásával ABC transzporterek (ABCC2, ABCC3, ABCB11) aktivitásának vizsgálatára. Humán és patkány primer hepatocita szendvicskultúrában tanulmányozták a transzportereken lejátszódó gyógyszerinterakciókat (gátlás, aktiválás). Az ABCC2/C3 transzporterek vizsgálatához bilirubin-glukuronidot, esztaradiol-17b-glukuronidot (E217bG), 5,(6)-karboxidiklórflooreszeint használtak szubsztrátként, az ABCB11 aktivitását a taurokolát transzportjának mérésével határozták meg. Modulátorként indometacint, probenecidet, benzbromaront, MK571-t (ABCC2), ciklosporin A-t, troglitazont, glibenklamidot (ABCB11) alkalmaztak. Az eredményeket *in vivo* végzett patkány biliáris efflux kísérletekkel hasonlították össze. Kis koncentrációban valamennyi modulátor aktiválta az E217bG kanalikuláris transzportját, az indometacin és benzbromaron *in vivo* is. Nagy koncentrációban transzportgátlást mértek mindkét transzporterén. Ezek az eredmények *in vivo* gyógyszerinterakciókat valószínűsítene, amelyek hepatotoxicitáshoz vezethetnek.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: –*

A Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával kialakított együttműködés keretében vizsgálják a transzplantációra szánt máj gyógyszerlebontó (méregtelenítő) képességét. A diagnosztikai rendszer a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő CYP enzimek aktivitásának és gén-expressziójának meghatározásán (fenotipizálás) alapul. Ezzel lehetőség van arra, hogy vérből történő mérésekkel következtessenek a máj aktuális gyógyszer-metabolizáló képességére, valamint, hogy előre jelezzék a donor máj esetleges csökkent gyógyszer-metabolizáló képességét. Ez ugyanis befolyásolhatja a beteg gyógyszeres kezelését, hiszen ebben az esetben a gyógyszeres terhelést csökkenteni kell. Érzékeny kvalitatív és kvantitatív LC-MS/MS-módszert dolgoztak ki a transzplantált betegeknél immunszuppresszánsként alkalmazott cyclosporin-A (CSA) és metabolitjainak vérből történő meghatározására. Az eljárás a klinikai gyakorlatban rutinszerűen alkalmazott mérési technikákat kiegészítve segít különbséget tenni az alacsony CSA-szint okozta szervkilökődés, valamint a magas CSA- és CSA-metabolit szint okozta toxicitás között.

*Kutatói kapacitás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: –*

#### *Szenzibilizátor és multidrog-rezisztencia kutatások*

Új, szintetizált szenzibilizátorok fotodinamikus hatását vizsgálták sejtenyészetben, a daganatos betegségek terápiájában használható hatásos gyógyszer(ek) fejlesztése céljából.

Lymphomás kutyák multidrog rezisztenciáját vizsgálták, hogy pontosabb meghatározást adhassanak a betegség malignitásának és a kemoterápiára adott válaszána hatásáról.

Beállították az érintett transzportfehérjék kimutatására alkalmas PCR-technikát is, ami kutya és macska multidrog-rezisztencia fehérjéire vonatkozott.

Védett (hidrogénezett) zsír és Ca-szappan takarmánykiegészítők hatását kezeletlen kontrollok mellett vizsgálták tejelő tehenek anyagforgalmára és antioxidáns státuszára az ellés körüli időszakban. A hidrogénezett triglicerid kiegészítésnek az energiaháztartás mutatóira és a máj lipidtartalmára az ellés után szignifikánsan kedvezőbb metabolikus hatása volt, mint a Ca-szappannak. Ugyanakkor az észlelt metabolikus változások nem befolyásolták az antioxidáns rendszer vizsgált tagjait.

*Kutatói kapacitás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 14 M Ft, ebből pályázati forrás: 3,2 M Ft.*

#### *Kemometriai kutatások*

Finn kutatókkal kooperációban kimutatták, hogy a koleszterin frakciók meghatározásának hibája függ attól, milyen frakciókra bontják a koleszterineket. Egyes frakciókat nem lehet pontosan meghatározni <sup>1</sup>H NMR mérési adatok kemometriai feldolgozásával, még akkor sem, ha kísérleti hiba nem zavarja a mérést és kiértékelését. Ezért ezek a frakciók nem használhatók diagnosztikai célokra. Az eljárás nagy jelentőségű a szív- és érrendszeri betegségek kimutatásánál, rizikócsoportok meghatározásában.

Nemzetközi együttműködésben sikerült egy új, nem invazív diagnosztikai eljárást kidolgozniuk a gyermekkori asztma, ill. allergiás esetek megkülönböztetésére. Az eljárás alapja, hogy a kilélegzett levegő NMR-analízisének adatait többváltozós technikákkal dolgozzák fel.

Felkérésre összefoglalót készítettek a kvantitatív szerkezet – retenció vizsgálatok témakörében. A mű a kromatográfia különböző részterületeit (GC, HPLC, TLC, affinitás-kromatográfia stb.) elkülönítetten tárgyalja, megadja a leggyakoribb tendenciákat és felhívja a figyelmet a leggyakrabban előforduló hibákra. A retenció előrejelzésére szolgáló változókat, a kísérleti körülményeket, a modell-vegyületeket és az irodalmi forrásokat táblázatosan foglalták össze.

*Kutatói kapacitás: 1 fő, ebből intézeti állományban: 1 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 M Ft, ebből pályázati forrás: 3 M Ft.*

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

#### *Hazai kapcsolatok*

Az MTA-kutatóhelyekkel és a felsőoktatási intézményekkel igen gyümölcsöző együttműködésekkel folytatnak, ezek mind az oktatás, mind a kutatás területére kiterjednek.

Az oktatómunkában való intenzív részvételüket mutatja, hogy az Intézet 10 kutatója rendszeresen végez oktatási tevékenységet az ELTE-n, ill. a Semmelweis Egyetemen. A hazai kutatóhelyekkel folytatott együttműködések részben pályázatokhoz is kapcsolódnak, ezért a IV. fejezetben további információk olvashatók a közös eredményekről. Az innovációban erősen érdekelt gyógyszervállalatokkal közös kutatási programokat alakítottak ki.

„Az uracil-DNS endonukleáz enzim molekuláris biológiai alkalmazásai” c. GVOP-téma kutatásait az MTA SZBK Enzimológiai Intézet, az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport és a MolCat Tudományos Kutató és Fejlesztő Bt. részvételével folytatják. A címben említett enzim affinitás-kromatográfiai tisztítására szolgáló immobilizálható oligonukleotidokat, valamint a BRCA1 mellrákot okozó onkogén egyes mutációinak kimutatására szolgáló molekuláris jelzőket állítottak elő.

„A domének közötti kölcsönhatás mechanizmusa és szerepe az enzimek térszerkezetének kialakításában és működésében” c. OTKA pályázati témában az MTA SZBK Enzimológiai Intézettel dolgoznak közösen.

„Az idegi szubcelluláris frakciók elektronmikroszkópiája” c. témában (a Szent István Egyetemen közös kutatások) patkányagykéregből izolált szinaptikus membránfrakciókat jellemezték.

A Semmelweis Egyetemen folytatott együttműködés keretében a szomatosztatin kötődését jellemezték *in silico*. A Humán Agyminta Bankkal kapcsolatos téma kutatásainak során megállapították, hogy a borostyánkősav specifikusan kötődik a *nucleus accumbens* agymintákból izolált szinaptikus membránfrakcióban.

Az ELTE-vel végzett közös munka a GABA kötődési módjának felismeréséhez vezetett *in silico*. Az említett témákból a Semmelweis Egyetemen három, a Szent István Egyetemen és az ELTE-vel egy-egy közös folyóiratcikket publikáltak.

A Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával a „Transzplantáción átesett betegek egyéni gyógyszeres terápiájának kialakítása” c. témában hoztak létre eredményes kooperációt. Az eredményekről közös folyóiratcikkekben számoltak be.

Az MTA SzBK Enzimológiai Intézettel a „DNS metilációs profiljának meghatározása” c. témában hoztak létre együttműködést.

Több tudományos publikáció jelzi a Pécsi Orvostudományi Egyetem karotinoidkémiai munkacsoportjával, valamint az ELTE TTK, Biokémia Tanszékével közös kutatások eredményességét.

A Pannon Egyetem (Veszprém) kutatóival kromatográfias retenciós adatok feldolgozása témában 2007-ben 6 közös publikációt jelentettek meg.

A Richter Gedeon NyRt.-vel folytatott közös munka 3 tudományos publikációt eredményezett.

„A transzporterek vizsgálata májsejteken” c. témában indukciós és gátlásvizsgálatokat végeztek a SOLVO Kft.-vel közösen.

Több hazai biotechnológiai, valamint gyógyszerállalattal folytatnak gazdaságilag előnyös és kutatási szempontból is érdekes együttműködések. Így pl. a Richter Gedeon Nyrt.-vel és az EGIS Nyrt.-vel is. Számos, gyógyszerkutatási szempontból érdekes vegyületet szintetizáltak, ill. hatástani vizsgálatokat végeztek. A Richter Gedeon NyRt.-vel folytatott közös munka három tudományos publikációt eredményezett.

„A transzporterek vizsgálata májsejteken” c. témában indukciós és gátlásvizsgálatokat végeztek a SOLVO Kft.-vel közösen.

„A növényvédőszeres kölcsönhatása humán efflux transzporter (MDR1 (P-gp), MRP1, MRP2 and BCRP) fehérjékkel” c. témában a Solvo Biotechnology, Szeged, céggel dolgoznak közösen. Az elmúlt évben végzett vizsgálatok alapján megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek az MDR1 szubsztrátjai és módosítják a gyógyszerek bélben történő felvételét. Csekély mértékű szerkezeti változtatások jelentősen befolyásolják a kölcsönhatást az MDR1 efflux fehérjével. Az MRP1 transzportálja az acetoklór glutation konjugátumot, megelőzve ezzel a toxikus akkumulációt. Ezek a transzporter vizsgálatok igen jelentősek az új növényvédőszeres használatával járó kockázati tényezők előrejelzésében.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet számos külföldi kutatóhellyel folytat tudományos együttműködést. MTA-kétoldalú egyezményes keretben 2007-ben két fő vett részt külföldi tanulmányúton, és három külföldi kutató érkezett az intézetbe. Nemzetközi konferencián 32 előadást és 24 poszter-előadást tartottak.

A COST B16 program keretében a „Reversal of multi drug resistance” c. témában három külföldi egyetemmel (University of Lisbon, Portugália; University of Reims, Franciaország; Comenius University, Bratislava, Szlovákia) folytattak közös kutatásokat. A közös munka során sikerült a vizsgált vegyületek multidrog-rezisztenciát gátló hatását kísérletileg kimutatniuk. Az eredményekből két közös publikáció született.

Az „Inverz gázkromatográfiás adatok feldolgozása, hordozók, segédanyagok osztályozása” c. MTA-Lengyel TA együttműködési témában (együttműködési partner: Poznani Műszaki Egyetem, Lengyelország) sikerült csökkenteni a redundáns oldhatósági paraméterek számát és egyúttal osztályozni a segéd- és töltőanyagokat. Az eredményekről 2007-ben négy cikket jelentettek meg.

Az Institute of Medicinal Chemistry, Hellenic Academy of Science (Athén) kutatóival folytatott együttműködés során egy közös publikáció született az eddigi tudományos eredményekből.

Kiterjedt és gazdaságilag is sikeres együttműködést folytatnak külföldi iparvállalatokkal. Így pl. a Nycomed Deutschland GmbH (Konstanz, Németország) gyógyszergyárral. Számos, potenciális gyógyszermolekulát szintetizáltak, illetve klinikai tesztekhez elegendő mennyiségben állítottak elő. Hasonlóképpen jelentős volumenű megbízásos munkát végeznek az ALTANA Pharma (Konstanz, Németország) és a Sigma-Aldrich (Steinheim, Németország) vállalatok részére is.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

Az NKTH-által kiemelten támogatott téma: „Hatóanyag-tervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján” kutatásai a MEDICHEM-konzorcium keretében 2007-ben lezárultak. Az igen sikeres kutatási program munkái során számos új vegyületet szintetizáltak, és tisztázták élettani hatásukat. A program jelentős mértékben elősegítette az egyetemi-akadémiai kutatók és a vállalati szakemberek kapcsolatainak erősítését.



„Az uracil-DNS endonukleáz molekuláris biológiai alkalmazásai” c. témában (GVOP-3.1.1-2004-05-0412/3.0) 2007. évben a címben szereplő enzim affinitás-kromatográfiai tisztítása céljából két, azonos szekvenciájú, egyenként 29 nukleotid egységből álló, a szekvencia közepén uracil-bázist tartalmazó oligonukleotidot szintetizáltak. Az egyik ligand a 3'-végen biotint, a másik az 5'-végen egy aminohexil végcsoportot tartalmaz, amelyek révén alternatív, de mindkét esetben stabil kötések alakíthatók ki a megfelelő szilárd hordozókkal. Előállították a ligandok közös komplementerét is, mivel korábbi vizsgálatok alapján az enzim a duplex formában lévő oligomerekhez erősebben kötődik. Emellett két kettősen jelzett 28-, ill. 40-mer oligonukleotidot is szintetizáltak, amelyek mint molekuláris jelzők a BRCA1, mellrákot okozó onkogén lehetséges mutációinak kimutatására használhatók fel. A biológiai kísérleteket a koordinátor (MTA SZBK Enzimológiai Intézet) kutatócsoportja végzi.

Az „Ionotróp receptorok allosztérikus modulációja” (OTKA K62203) c. téma 2007. évi feladatainak megoldása során kifejlesztettek egy GABA<sub>A</sub> receptorokra nanomólos affinitással ható, alegység-szelektív neuroszteroid antagonistát.

A „Biológiailag jelentős, nem-kovalens kölcsönhatások vizsgálata: fehérje-kötődés, nukleinsav-kötődés, önszerveződés” (OTKA T049721) c. téma keretében több gyógyszer specifikus kötődésvizsgálatát végezték el AGP genetikai variánsain. Allosztérikus kötődési kölcsönhatást mutattak ki dicoumarollal. Új analitikai módszert dolgoztak ki humán AGP-minták vizsgálatára.

A „Különböző tulajdonságok előrejelzése szerkezet-sajátság összefüggésekkel. Modellek összevetése objektív módszerekkel” c. MTA-OTKA-NSF közös projekt keretében két dolgozatot jelentettek meg.

NKTH Jedlik Ányos pályázat keretében (NKFP-1-012/2005) a „Kardioprotektív nanoformulációk karotinoidok in silico módszerekkel segített molekuláris kapszulázása útján” c. témában elvégezték számos új, vízoldható karotinoid-ciklodextrin komplex antioxidáns- és stabilitás-vizsgálatát, tanulmányozták a komplexek aggregációs sajátságait.

Az NKTH-által támogatott Jedlik Ányos pályázat keretében a Cyclolab Kft-vel közös szabadalmat dolgoztak ki.

Az EU FP-6 program „Functional genomics of complex regulatory networks from yeast to human: cross-talk of sterol homeostasis and drug metabolism (STEROLTALK)” c. témájában 10 partner (7 ország) részvételével egy olyan tesztrendszeren dolgoznak, amely alkalmas a vér koleszterinszintjét csökkentő gyógyszerek hatásának tanulmányozására és új gyógyszer-jelölt vegyületek kiválasztására. Emellett lehetőség nyílik az ismert xenobiotikumok, gyógyszerek okozta koleszterin-homeosztázis változások poszt-genomiális értékelésére. A program elsődleges célkitűzése a gyógyszerhatásra bekövetkező koleszterin homeosztázis-változások meghatározása transzkriptom, proteom és szterol-metabolom szinten. Az együttműködő partnerintézmények a következők: Universitaet des Saarlandes, Saarbrücken, Németország; University of Ljubljana, Szlovénia; CNRS, Centre de Génétique Moléculaire, Gif-sur-Yvette, Franciaország; Swansea Clinical School, University of Wales Swansea, Wales, UK; Karolinska Institutet, Huddinge University Hospital, Stockholm, Svédország; Biozentrum, University of Basel, Svájc; INSERM UMR, Montpellier, Franciaország; Lek Pharmaceuticals d.d., Ljubljana, Szlovénia, CREA d.o.o., Ljubljana, Szlovénia. A program eredményességét mutatja, hogy eddig 13 közös publikációt jelentettek meg.

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

1. Nagy I, Hajós Gy, Riedl Zs, Egyed O, Pápai I: A novel ambident reactivity of azolylacroleins, *Tetrahedron* 63(22): 4730–4736 (2007)
2. Moldvai I, Dörnyei G, Temesvári-Major E, Szántay Cs: A practical one-pot synthesis of Weinreb-like amides of (*S*)- and (*R*)-*N*-BOC-pipecolic acids from ( $\pm$ )-piperidine-2-carboxylic acid, *Organic Preparations and Procedures Int.*, 39, 503–508 (2007)
3. Simon Á, Kéri Gy, Kardos J: Comparison of the binding modes of TT-232 in somatostatin receptors type 1 and 4, *Journal of Molecular Structure-Theochem* 816(1-3): 73–76 (2007)
4. Tatai J, Fügedi P: A new, powerful glycosylation method: Activation of thioglycosides with dimethyl disulfide-triflic anhydride, *Organic Letters* 9(22): 4647–4650 (2007)
5. Héberger K: Quantitative structure-(chromatographic) retention relationships, *Journal of Chromatography A* 1158(1-2): 273–305 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	80	Ebből kutató <sup>2</sup> :	58
PhD, kandidátus:	23	MTA doktora:	9
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
			27
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			47
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			47
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	37
nemzetközi együttműködés keretében:	18	SCI által regisztrált folyóiratban:	37
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	102,932	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	773
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			554
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	4
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	2	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	32	posztterek száma:	24
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			10
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	7	Gyakorlati kurzusok száma:	2
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	17
			318
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			353,5 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	5	Teljes saját bevétel:	366,2 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			7
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	25,3 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			3
NKFP:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	103,5 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	39,1 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7,2 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			26
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	191,1 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

**Kémiai Kutatóközpont**  
**FELÜLETKÉMIAI ÉS KATALÍZIS INTÉZET**  
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67., 1525 Budapest, Pf. 17.  
Telefon: 438–1166, Fax: 438–1164  
e-mail: erika.kalman@chemres.hu, honlap: www.chemres.hu

## **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a felületkémia és a heterogénkatalízis-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.

Az intézet kiemelkedően fontos tevékenységi területe volt 2007. évben is a hazai, illetve az európai kutatási pályázatok aktuális feladatainak teljesítése.

Az intézet tevékenysége a korábbi évekhez képest jelentősen bővült az elmúlt évben. A kutatómunkába új laboratóriumok (Reakciókinetikai Laboratórium, Nukleáris Kémiai Laboratórium) és új kutatók kapcsolódtak be. Ennek révén lehetővé vált a tematika kiszélesítése és új vizsgálati technikák bevezetése.

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

### *Nanotudományi kutatások*

Folytatták a szén-nanocsövek funkcionálizálását. Ezek a kutatások a szén-nanocsövek felületének a kívánt célokra történő átalakításához vezettek, ami lehetővé teszi a nanocsövek sokoldalú felhasználását, új típusú bevonatrendszerek kialakítását.

A kutatás célja egy egyszerű funkcionálizáló eljárás kidolgozása volt többfalú szén-nanocsövekre olyan módosítással, melynek révén a nanocső diszpergálhatósága megnövekszik, ugyanakkor vezetőképessége nem változik. Fontos szempont volt, hogy az eljárás környezetbarát, az előállított termék pedig, termikusan elegendően stabil legyen. Az előkísérletek alapján megállapítható, hogy a kutatók által kidolgozott módosító eljárás alkalmas kisüzemi vagy ipari méretekben történő előállításra. A módosított nanocsövek egyik típusa közvetlenül vezető polimerrel, más típusa szerkezeti polimerrel történő elegyítést tesz lehetővé. A kutatás-fejlesztés eredményei az Európai Unió 6-os keretprogramja keretében (POLYCOND project) hasznosultak.

A szén-nanocső/polimer nanokompozit kombinációkat nanoindentációval és atomierő-mikroszkóppal (AFM) vizsgálták. Megállapították, hogy a keménységet a nanocső hozzáadása növeli, de a kopásállóságot rontja.

Kopásálló vékonyrétegek nanoindentációval és AFM-mel történő vizsgálata során megállapították, hogy a többkomponensű nanokompozit rétegek kemények, de nem

lyukmentesek, és tulajdonságaik inhomogének. A munka EU-együttműködés keretében (EXCELL) tovább folytatódik.

Komplex szerkezetű vékonyrétegek vizsgálatára alkalmas spektrális ellipszométert helyeztek üzembe. Megvalósítás alatt áll az *in situ* elektrokémiai mérőegyütes felépítése is.

Gyorshűtéssel előállított fém-kerámia nanokompozitokról és porkohászati úton feldolgozott Al-kompozitokról kimutatták, hogy mechanikai tulajdonságaik jobbak, mint a hagyományos alumíniumtermékeké, és előállításuk a javasolt technológiával megoldható. Az eredmények konzorciumi együttműködés (Jedlik-pályázat: ALUTITAN) keretében hasznosulnak.

Nanoszenzorok kutatása terén az egészségre veszélyes gázok kimutatására szolgáló széles spektrumú vegyjelző szenzorcsoportot minősítettek impedanciaspektroszkópiai mérésekkel. Meghatározták a szenzorok érzékenységét, az optimális frekvenciákat, vizsgálták a reverzibilitást és a válaszidőt.

*Kutatói kapacitás: 19,5 fő, ebből intézeti állományban: 19,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 79,5 M Ft, ebből pályázati forrás: 68,25 M Ft.*

#### *Komplekxkémiai kutatások*

A kobaloxim(II) és ferroxim(II) komplexek esetében megfigyelt pirokatechin oxidáz és fenoxazinon szintetáz típusú aktivitás vizsgálatát kiterjesztették vas(II) és mangán(II) dioximátokomplexekre. Megállapították, hogy a dioximáto-vas(II) komplexek metanolos oldatban katalizálják a 3,5-di-terc-butyl-pirokatechin oxidációját a megfelelő benzokinon származékká. A dioximáto-mangán(II) komplex önmagában nem reagál dioxigénnel és nem is katalizálja a 3,5-di-terc-butyl-pirokatechin, ill. a 2-amino-fenol oxidációját o-benzokinonná, ill. amino-fenoxazinonná. Ha a mangán(II)komplexet a szubsztrátumok és a trietil-amin dioxigénnel reagáló elegyeihez adjuk, akkor mindkét esetben jelentős mértékben megnő az oxidáció sebessége. Ennek oka egy új reakcióút megjelenése a bázis és a Mn-komplex kölcsönhatása következtében, ez az ún. "mangán-aktivált báziskatalízis", amit elsőként sikerült megfigyelniük.

*Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft.*

#### *Heterogén katalízis kutatások*

Hordozós katalizátorok előállítása céljából már korábban kidolgozták az irányított felületi reakciók módszerét, melyet az elmúlt évben is eredményesen alkalmaztak ón-platina kétfémes rendszerek előállítására. Mössbauer-spektroszkópia segítségével sikerült bizonyítani, hogy a módszer még nagy óntartalom esetén is szelektíven módosítja az alumíniumoxid és szilícium-dioxid hordozós katalizátorok platina nanorészecskéit ón-multirétegek képződése révén. Az irányított felületi reakciók módszerét sikerült kiterjeszteni az ón mellett germánium módosítóra, valamint aktív-szén-hordozós platinakatalizátorokra is. Az ily módon előállított aktív-szén-hordozós germánium-platina katalizátorok hatékonyan alkalmazhatók a telítetlen alkoholok (citrál) hidrogénezésében. A felületi fémorganikus kémia sikeres alkalmazása aktív-szén-hordozón kivételes és újszerű a szakirodalomban.

A gyógyszer-, növényvédő szer és illatszeripar számára egyre fontosabbá váló, optikailag tiszta anyagok előállításának egyik módszere az aszimmetrikus hidrogénezés. A keto-észterek

aszimmetrikus hidrogénezésének vizsgálatából megállapították, hogy a szakirodalomban általánosan elfogadott modell módosításra szorul.

Arany nanorészecskék szilikagélen történő stabilizálására és a részecskeméret szabályozására új módszert dolgoztak ki. A korábbi irodalmi adatokkal szemben az arany nagy katalitikus aktivitást mutat a szénmonoxid oxidációjában. A kutatóknak sikerült nagydiszperzitású ón-oxid nanorétegeket előállítaniuk. Szerkezetüket különböző hordozókon vizsgálták. Bebizonyosodott, hogy a szén-monoxid oxidációs reakciójában az ón jelentősen promoveálja az alumíniumoxid-hordozós aranykatalizátorokat.

A metanol tüzelőanyag-cellák fontos eleme a szénhordozós platina anódkatalizátor, amely azonban a hidrogén tüzelőanyag szénmonoxid-tartalmától könnyen mérgeződik. A CO-tűrés növelésének módja lehet az adszorbeált szénmonoxid alacsony túlfeszültségeknél történő oxidációja.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 31 M Ft, ebből pályázati forrás: 15,5 M Ft.*

#### *Fotokatalízis kutatások*

A hidrogén termelési és tisztítási eljárások új típusú katalizátorok kifejlesztését igénylik. Ennek érdekében katalizátor-könyvtárak optimalizálását végezték el szénmonoxid preferenciális oxidációjának nagymennyiségű hidrogén jelenlétében történő megvalósítása céljából. A többkomponensű magnéziumoxid-hordozós aranykatalizátorok tervezése során a katalizátorfejlesztés eredményeként közel 94 %-ban sikerült a széndioxidot eltávolítani, miközben az oxigén szelektivitása a CO oxidációjára 55 % felett maradt, azaz jelentősen sikerült visszaszorítani a hidrogénfogyást. Kombinatorikus módszerek alkalmazása nélkül ezt nem lehetett volna megvalósítani.

További fejlesztéseket végeztek, amelyek a vízgáz reakció (hidrogéntisztítás), az etanol reformálása és a fotokatalitikus vízbontás (hidrogénelőállítás) megvalósítására irányultak. A reformálásos vizsgálatokban bioetanol szolgál alapanyagként.

*Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: 7 M Ft.*

#### *Mikro- és mezopórusos anyagok kutatása*

A növényolajok heterogén katalitikus hidrokonzverzióját tanulmányozták gázolaj forráspont tartományába eső, nagy n-alkán-tartalmú termékeleggyé. Tisztázták a katalitikus mechanizmus leglényegesebb jellemzőit. Az alkánképződés konzekutív reakciólépésekben valósul meg. A konzverzió az olaj telítésével és a zsírsav-észterek hidrogenolízisével indul. Az alkánok a hidrogenolízisben keletkező zsírsavak oxigéntelenítésével képződnek. Az alkán termékelegyet téli minőségű dízelolajnak megfelelő hidegtulajdonságokkal és kiváló cetánszámmal (>60) rendelkező, n- és i-alkánokat tartalmazó dízelgázolaj keverőkomponenssé alakították.

Kimutatták, hogy a zsírsavak oxigéntelenítése hordozós fémkatalizátorokon (Ni, Pt, Pd) főként hidrodekarbonilezéssel játszódik le. A reakció termékei alkánok és szén-monoxid. A szén-monoxid a katalizátoron metanizálódási és vízgáz reakciókban vehet részt.

Hordozós fém-oxid (NiMoO<sub>x</sub>, CoMoO<sub>x</sub>) katalizátorokon a reakció termékei alkánok és víz.

A kutatási eredményeket ipari katalizátor fejlesztésénél hasznosítják. Az ipari katalizátorok nagylaboratóriumi vizsgálatát a MOL Zrt.-nél és a Pannon Egyetemen folytatják. A kutatás-fejlesztés eredményeire alapozva a MOL Zrt. 200 000 t/év kapacitású növényolaj-feldolgozó üzem építését tervezi. A kutatás, a létesítendő üzem révén, hozzájárul az EU biohajtóanyagokra vonatkozó előírásainak magyarországi teljesítéséhez.

*Kutatói kapacitás: 2,5 fő, ebből intézeti állományban: 1,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 18 M Ft.*

#### *Nanoszerkezetű fémkatalizátor kutatások*

Részletesen elemezték különböző aminosavak adszorpcióját titándioxid( $\text{TiO}_2$ ) felületen. Emellett további, biológiai szempontból fontos felületeken ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{CaF}_2$ ) lejátszódó aminosav-adszorpciós folyamatokat is nyomon követték. Az eredmények megerősítik azt a korábbi feltevést, hogy a savas oldallánc jelenléte meghatározó fontosságú a  $\text{TiO}_2$ -felülethez való kötődésben. Megállapították, hogy az adszorpció a savas aminosavak esetében igen gyors: a  $\text{TiO}_2$ /aminosavoldat határfelület kialakítása után egy-két perc alatt létrejön a stabil adszorbeált réteg. Valószínű, hogy az aszparaginsav molekulák mindkét savas csoportja a felülethez koordinálódik. Megállapították továbbá, hogy  $\text{SiO}_2$ -on az oldat/szilárd határfelületen nem alakul ki adszorbeált réteg, a felületre rászárított molekulák kisméretű kristályokba rendeződnek.  $\text{CaF}_2$ -hordozón az aminosav-kristályok képződése már az oldat/szilárd határfelületen is megfigyelhető volt. Ezen kutatások tehát igazolták, hogy a  $\text{TiO}_2$  más kerámia jellegű felületekhez képest lényegesen erősebb affinitást mutat aminosavak adszorpciójára, ami feltehetőleg kapcsolatba hozható a felület biokompatibilis tulajdonságával.

Polietilénimin oldat felszínére terített semleges (iakerionos), valamint anionos foszfolipid monorétegek spektrumait vették fel az oldatkoncentráció és a pH, valamint a felületi lipidborítottság függvényében. A lipid monoréteg/polimer oldat határfelületen elhelyezkedő vízmolekulák vizsgálatával megállapították, hogy tiszta vízre terítve a foszfolipid-molekulák poláris fejcsoportjai a határfelületi vízmolekulák rendezettségét megnövelik, a polikationnal történő kölcsönhatás azonban a vízszerkezet rendezettségének csökkenéséhez vezet.

Lineáris és elágazó, rövid szénláncú alkoholok adszorpcióját tanulmányozták  $\text{TiO}_2(110)$  egykristályfelületen összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával. Megállapították, hogy az alkalmazott kísérleti körülmények között a vizsgált alkoholok molekuláris fiziszorpcióval kapcsolódnak az oxidfelülethez.

Kémiai eljárásokkal funkcionizált, többfalú szén-nanocsövek vizsgálatát végezték el. Az összetételt és a kötésviszonyokat röntgen fotoelektron-spektroszkópiával elemezték.

Kísérleti és elméleti úton is igazolták, hogy lineáris és nemlineáris rezgési spektroszkópiai módszerek kombinációjával felületi peptidek és fehérjék szerkezetéről nagyon részletes szerkezeti információ nyerhető. Az eljárás szilárd/folyadék határfelületen vagy akár a sejtmembránban elhelyezkedő fehérjék és peptidek esetében is alkalmazható.

Alumínium ötvözetek korróziójának gátlására szolgáló  $\text{CeO}_2$ /(bis-1,2-(trietoxiszilil)-etán) rétegpárt vizsgáltak elektronspektroszkópiai eszközökkel. Az együttműködő partner által végzett elektrokémiai vizsgálatokkal együtt az eredmények igazolták, hogy a kettősréteg lényegesen jobb korrózióvédő tulajdonságokkal rendelkezik, mint az egyedi összetevő rétegek.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 18 M Ft, ebből pályázati forrás: 5,8 M Ft.*

### *Reakciókinetikai kutatások*

Etanol és metanol aromatizációjának tanulmányozása során megállapították, hogy a  $\text{Mo}_2\text{C}$  rávitele a savas centrumokat tartalmazó ZSM-5 mintákra megváltoztatja a zeolit katalitikus viselkedését, és jelentős mértékben megnöveli az etanolból a különböző aromás vegyületek keletkezésének esélyét. Hasonló, de kisebb promotor-hatást tapasztaltak  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  és  $\text{ZnO}$  hozzáadásakor. Kimutatták, hogy az aromás vegyületek képződésében döntő lépés az etanol dehidratációjában előálló etilén aktiválása és aromatizációja. Az előbbi munkában hatásosnak talált katalizátorok aktívnak bizonyultak a metanol aromatizációjában is. Főtermékként benzolt, xilolt, toluolt és C9 aromás vegyületeket azonosítottak. Az aromatizáció ebben az esetben is etiléneken keresztül megy végbe, de ezt megelőzően a katalizátoron lejátszódik a C-C kötés képződése.

Hidrogén előállítását vizsgálták  $\text{Mo}_2\text{C}$ -alapú katalizátorokon. Megállapították, ha a ZSM-5 hordozó helyett szén-nanocsövet, vagy Norit-szenet alkalmaznak, akkor drámaian megváltozik az alkoholok bomlása: aromás vegyületek képződése helyett a hidrogénné történő bomlás kerül előtérbe. A  $\text{Mo}_2\text{C}$  előnyös tulajdonsága a katalizátor nagy stabilitása. A  $\text{Mo}_2\text{C}/\text{C}$  katalizátorok katalitikus hatásossága összemérhető a drága nemes fémek katalitikus aktivitásával.

Az NO és az etanol katalitikus reakciójának tanulmányozásában tisztázták a reakció során képződött izocián-komplex kémiaiáját. Korábbi kutatásuk folytatásaként megvizsgálták a  $\text{CH}_2\text{I}_2$  bomlása révén előállított  $(\text{CH}_2)$ -species adszorpcióját és felületi reakcióját  $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Mo}(100)$  felületen. Kísérleti módszerként nagy felbontású elektronenergia-veszteség spektroszkópiát (HREELS) és röntgen fotoelektron-spektroszkópiát alkalmaztak (XPS). Kimutatták, hogy a metilén 160 K körül  $\pi$ -kötésű etilénné alakul. Káliumadalék elősegíti a  $(\text{CH}_2)$ -fragmentek kapcsolódását.

Részletesen vizsgálták az elektron-, foton- és ionspektroszkópiai módszerekkel jellemzett mono- és bimetalikus nanoszerkezetek tulajdonságait. A morfológiát elsősorban STM-módszerrel követték. A fém-nanorészecskék szerkezetét, a hordozóval való kölcsönhatását AES-, XPS- és LEIS-módszerrel határozták meg. Szerkezetvizsgálati tanulmányaikat kiterjesztették a potenciálisan fémet helyettesítő molibdén-karbid nanostrukturákra is. Jellemezték az (Au-Mo)-bimetalikus rendszer sajátosságait, de kiterjedtebb vizsgálatokat végeztek a polikristályos hordozóra felvitt (Au-Rh)-bimetalikus nanorendszeren. Megállapították, hogy a kopartner elősegíti az arany diszperzitásának növelését és stabilitását. Tesztreakcióként elsősorban a hidrogén jelenlétében végbemenő szénmonoxid-oxidációt használtak. A technológiailag fontos, ún. PROX-reakcióban az eddigi vizsgálatok azt mutatják, hogy optimális Au-Rh arányt alkalmazva a szénmonoxid-oxidáció jó hatásfokkal hidrogén jelenlétében is lejátszódik. (C-N)-tartalmú vegyületek átalakításában az eddig tanulmányozott kétfémes nanorendszerek biztató eredményeket mutatnak mind technológiai, mind környezetvédelmi eljárásokban történő hasznosítás céljára.

*Kutatói kapacitás: 10 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 49,5 M Ft, ebből pályázati ráfordítás: 9,5 M Ft.*

### *Nukleáris szerkezetvizsgálati kutatások*

A Glasgow-i Caledonia Egyetemmel együttműködve, sikerült újabb, igen hatásos korrózióvédelmi galvánbevonatokat készíteniük. Az elektrokémiai leválasztás paramétereinek alkalmas megválasztásával és szisztematikus változtatásával előállították az (Sn-Co-Fe) terner



ötövetbevonatot. Az elektrokémiai úton nyert ötvözetek szerkezetét, elem- és fázisösszetételét, valamint mágneses orientációját röntgendiffrakcióval, pásztázó elektronmikroszkóppal, elektron mikropróba-analízissel és  $^{57}\text{Fe}$ , valamint  $^{119}\text{Sn}$  Mössbauer-spektroszkópiával vizsgálták az előállítási paraméterek függvényében. Megállapították, hogy az (Sn-Co-Fe)-terner ötvözetek túlnyomó részben új, eddig nem ismert fázisokból állnak. Ezek termikus úton nem állíthatók elő és nem szerepelnek az egyensúlyi fázisdiagramban sem. Ezeknek ígéretes felhasználása lehet elektródaként akkumulátorokban is.

$^{57}\text{Fe}$  Mössbauer-spektroszkópia segítségével rendkívül nagy, 157,6 T belső mágneses teret figyeltek meg a  $\text{Fe}[\text{C}(\text{SiMe}_3)_3]_2$  vasvegyületben. Ilyen nagy belső mágneses teret eddig még vasvegyületben senki sem mért. Elméleti molekulapálya-számításaik alapján magyarázatot adtak a szokatlanul nagy mágneses tér fellépésére.

A kolosszális mágneses ellenállást (KME) mutató anyagok fontosak az adattároló-gyártás és fejlesztés számára. 2007-ben perovszkit szerkezettel rendelkező KME-anyagok szerkezetvizsgálatát végezték el Mössbauer-spektroszkópia és mágneses mérések segítségével. Részletesen elemezték ezen anyagok elektromos és mágneses fázisátalakulásait mind az összetétel, mind a hőmérséklet függvényében. Ezzel párhuzamosan elemanalízist és mágneses szuszceptibilitás méréseket is végeztek. Francia együttműködés keretében további alacsony hőmérsékletű és nagy külső mágneses térben felvett Mössbauer-spektrumokat is készítettek. Méréseik alapján bizonyítható a stronciumhelyettesítés hatására történő fázisátmenet, illetve a külső mágneses térnek a mágneses klaszterekre gyakorolt hatása.

Mössbauer-spektroszkópia segítségével vizsgálták a növényi vasszorbó mechanizmusát uborka és búza esetében. Méréseiket TÉT-együttműködés keretében kiterjesztették az uborka gyökerének folyékony hélium hőmérsékletén készült mérésére. Az eredmények alapján kiegészítették a vasszorbó mechanizmusára vonatkozó eddigi ismereteket.

Gyógyszertechnológiailag fontos polimerekben vizsgálták az öregedés és a vízfelvétel hatásait pozitronannihilációs és hagyományos polimervizsgáló módszerek kombinációjával. A hatóanyag kioldódását különböző szerkezetű polimerekben pozitronannihilációs mérésekkel követték nyomon. A munka eredményeit a gyógyszeriparban tablettabevonatok tervezésénél alkalmazzák.

*Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft.*

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

#### *Hazai kapcsolatok*

A kutatóhely széles körben és eredményesen folytat együttműködéseket mind a hazai egyetemekkel és más akadémiai kutatóhelyekkel, mind iparvállalatokkal. A kapcsolatok magukban foglalják a közös kutatási pályázati tevékenységet, de kiterjednek az oktatásra, valamint a tudományos rendezvények szervezésére is.

Az oktatómunkában való igen aktív részvételt igazolja az Intézet kutatói által tartott elméleti kurzusok, ill. gyakorlatok, továbbá a PhD-t, diplomamunkát és szakdolgozatot készítő hallgatók jelentős száma (lásd a mellékelt összefoglaló táblázatot). Különösen a BME-vel és az ELTE-vel erősek a szakmai és oktatási kapcsolataik. Az egyetemi kutatókkal összesen 32 közös publikációt jelentettek meg 2007-ben.

Passzívált vasfelületen kialakított foszfonát védőrétegek Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata alapján megállapították, hogy a vas-foszfonát réteg vastagsága nem mérhető, aktívabb, párologtatott és ionimplantált Fe<sup>57</sup>-réteget használva viszont a vas(II)-foszfonát és vas(III)-foszfonát réteg is kimutatható. Az ELTE Magkémia Tanszékkal folytatott együttműködés eredményeiről két tudományos dolgozatot jelentettek meg 2007-ben.

A Szegedi Tudományegyetemmel az „Új mezopórusos katalizátorok előállítása és vizsgálata” c. témában hordozós Ni-katalizátort állítottak elő egységes pórusátmérőjű, hexagonális elrendeződésű, mezopórusos szilícium-dioxid hordozó alkalmazásával. Felderítették a katalizátor hatásmechanizmusát toluol hidrogénezésében. Két közös publikációt jelentettek meg.

A BME-vel az „Új aktívszén készítmények előállítása és vizsgálata” c. témában szén molekulaszitát állítottak elő fából, és eljárást dolgoztak ki a molekulaszita tulajdonságok módosítására. Az eredményeket két publikációban foglalták össze.

A Pannon Egyetemmel a „Biogázolaj előállítása növényolaj katalitikus hidrokonzverziójával” c. témában dolgoznak közösen. Heterogén katalitikus eljárást dolgoztak ki biogázolaj cetánszámának javítására. A közösen elért eredményekről két tudományos közleményben adtak tájékoztatást.

Az ELTE Kémiai Intézet kutatóival együttműködve sikerült újabb, igen hatásos korrózióvédelmi galvánbevonatokat készíteniük. A paraméterek alkalmas megválasztásával és szisztematikus változtatásával sikerült előállítani az (Sn-Co-Fe) terner ötvözetbevonatot. 2007-ben 19 közös publikáció jelzi a nukleáris szerkezetvizsgálati módszereket alkalmazó kutatási kooperáció kiemelkedő eredményességét.

MTA-intézetekkel is sikeres közös kutatásokat folytattak, így az ATOMKI és az IKI kutatóival hét közös dolgozatot írtak.

Az intézet kiterjedt, hazai ipari kapcsolatait mutatja, hogy összesen hét K+F projektben (MAGNESOM, ALUTITAN, NANOLAKK, METANANO, NANODRUG, SPEC-PUR, ALMA-ACID) vesznek részt közösen a következő iparvállalatokkal: TKI-Ferrit Kft.; Pharmathesis Bt.; Megapharma Kft.; Vet-Pharma Kft.; BAYATI, Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológiai Intézet; S-Metalltech 98 Anyagtechnológiai Kutató-Fejlesztő Kft.; Metal-Art Nemesfémipari Rt.; TMP Titanium Metal Processing Kereskedelmi és Szolgáltató Kft.; Egrokkorr Rt.; Kálmán Bútoripari Kft.; Dunamenti Tűzvédelem Rt.; Festékipari Kutató Kft.; KEMIKÁL Rt.; MAL Rt.; Poli-Farbe Vegyipari Kft.; Metal-Art Nemesfémipari Zrt; Elastico Kft., Nanochem Kft..

„Új, szennyvíz- és iszapkezelésre alkalmas adalékanyag előállítása a rudabányai vasércdúsító meddőjének kémiai feldolgozásával” c. GVOP-kutatások során eljárást fejlesztettek ki flokkulálószerként alkalmazható vas(III)-klorid oldat gyártására. Együttműködő partnerintézmények: Multiprojekt Fejlesztő, Vállalkozó, Kivitelező Kft., Budaörs; Jelen és Jövő Kft., Szeged.

### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézetnek hagyományosan széles körű és eredményes nemzetközi tudományos kapcsolatai vannak. A kapcsolatoknak TÉT-együttműködési, ill. kétoldalú, akadémiák közötti szerződések adnak keretet. MTA-kétoldalú egyezmények keretében 2007-ben 13 kutatót fogadtak; az Intézet kutatói közül öten vettek részt külföldi tanulmányúton MTA-egyezményes témában. Nemzetközi konferenciákon 49 előadást tartottak.

„A réz új korróziós inhibitorai– Csökkenthető a környezeti kockázat?” c. TÉT-egyezmény lehetővé tette, hogy a University of Zagreb kutatóival új korróziós inhibitorokat fejlesszenek ki. Az eredményekről négy közös publikációban számoltak be.

A „Különböző fémek mikrobiológiai korróziója – a folyamat gátlása és gazdasági szempontok” c. TÉT-projekt keretében (University of Lisbon) a mikrobiológiai korrózió gátlására új, gazdaságilag is versenyképes inhibitorokat fejlesztettek ki. Hét közös publikációt jelentettek meg.

Az „Új típusú heterogén katalizátorok alacsony hőmérsékletű oxidációra” c. román-magyar-TÉT együttműködés (partnerintézmény: Institute of Physical Chemistry "Ilie Murgulescu" of the Romanian Academy of Science, Bukarest) során oxidkatalizátorokat állítottak elő. Vizsgálták elektromos vezetőképességüket és szénmonoxid-oxidációban, valamint propán oxidációban történő alkalmazhatóságukat. Az eredményeket közös publikációban foglalták össze.

A „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagokként” c. témában, MTA-BTA egyezmény keretében (együttműködő partner: Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia, Bulgária) az eredményes kutatási kapcsolatok révén három közös publikációt jelentettek meg.

Az „Indium alakulatok jellemzése indium és indium-palládium zeolitokban” c. argentin-magyar TÉT-egyezmény keretében (együttműködő partnerintézmény: INCAPE, FIQ, UNL-CONICET, Santa Fe, Argentína) kölcsönös tanulmányutak valósultak meg. A közös kutatások eredményeit folyóiratcikkekben publikálták.

A Polytechnic School of the São Paulo University, Brazília kutatóival folytatott együttműködés során alumínium-ötvözet korróziójának gátlására szolgáló  $\text{CeO}_2$ /(bis-1,2-(trietoxiszilil)-etán) rétegpárt vizsgáltak elektrokémiai és elektronspektroszkópiai eszközökkel. A vizsgálatok igazolták, hogy a kettősréteg lényegesen jobb korrózióvédő tulajdonságokkal rendelkezik, mint az egyedi összetevő rétegek. Az eredményekről közös folyóiratcikkekben számoltak be.

Az MTA-Orosz Tudományos Akadémia közötti együttműködés „Növényi és bakteriális metabolitok fémekkel való kölcsönhatásának vizsgálata” c. témában (partner: OTA Biokémiai és Növényélettani Kutatóintézet) megvizsgálták és leírták a vas(III)-komplex képződésének és redukciójának mechanizmusát indol-3-karbonsavat, ecetsavat, propionsavat, illetve butánsavat tartalmazó vizes oldatokban. Megállapították, hogy a két kation-kötőhely nem azonos affinitással köti meg a  $(\text{Co}^{2+})$ -ionokat. 2007-ben két közös publikációt jelentettek meg.

A „Fe-EDTE és rokon komplexek hidrogén-peroxidos oxidációja mechanizmusának vizsgálata” c. témában MTA-OTKA-NSF mobilitási támogatás (partnerintézet: Florida Institute of Technology, Melbourne, FL, USA) több tanulmányút valósult meg. Három közös folyóiratcikk jelent meg az eredményekről.

A „Mágneses ellenállást mutató perovszkitok és biológiailag fontos vegyületek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” c. témában (magyar-francia TÉT-egyezmény; CNRS Le Mans Szilárdtestfizikai Kutatólaboratórium) folyó együttműködés nagyon hasznos, mivel a partnerek jól kihasználják az egyes laboratóriumokban lévő, egymást kiegészítő műszereket. Az eredményekről 2007-ben két közös dolgozatban számoltak be.

Az „Elektrokémiai bevonatok előállítása és jellemzése” c. témában (együttműködő partner: Caledonian University, Glasgow, UK) új amorf és ferromágneses biner és terner ötvözetbevonatokat állítottak elő és jellemeztek. A sikeres közös munkát két közös publikáció megjelenése igazolja.

A „Fémek, ötvözetek és oxidok vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: University of Tokyo, Japán) a spintronikában alkalmazható, dópolt félvezető, nanoszerkezetű oxidok ferromágneses tulajdonságával kapcsolatos új eredményekhez jutottak a Mössbauer-spektroszkópiai mérések révén. Az eredményeket három közös publikációban foglalták össze.

Nagyon sikeres az “Üvegállapot vizsgálata” c. kutatási projekt (együttműködő partner: Kinki University és Ube National College of Technology, Japán), aminek eredményeként elektromos vezetőképességgel rendelkező, a partner által szabadalmaztatott, Japánban már ipari gyártásban is lévő amorf üvegek vizsgálata során sikerült alkalmas hőkezelési körülményeket találni a kedvező elektromos tulajdonságok kialakításához. Három közös publikációt jelentettek meg 2007-ben.

A „Különleges elektromos és mágneses tulajdonságú anyagok előállítása és vizsgálata” c. téma kutatásainak során (együttműködő partner: Institute for Chemical Technology of Inorganic Materials, Johannes Kepler University, Linz, Ausztria) új nontronit formációt találtak és jellemeztek. Az eredményekről két publikációt jelentettek meg 2007-ben.

Kétoldalú együttműködés (partner: Lybian Petroleum Research Institute) keretében két új korróziós inhibitorösszetételt dolgoztak ki nagy kloridion-koncentrációjú hűtővízközeghez. Ezek közül az egyik foszfonát alapú termék. A projekt keretében konzultációt és szakmai továbbképzést tartottak a líbiai korróziós mérnökök és kutatók számára mind Budapesten, mind Tripoliban.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A „HUNN Sixth Framework Programme – Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences” c. projekt koordinátora az intézet. A projektben 13 intézmény vesz részt, ebből 7 magyar (MTA KK, BME, ELTE, Miskolci Egyetem, Debreceni Egyetem, Szegedi Egyetem, BAYATI) és 6 külföldi intézmény (SciTech Link, Svédország; Tel Aviv University, Izrael; NMRC, Cork, Írország; Lund University, Svédország; Atomic Energy Commission Grenoble, Franciaország; University of Newcastle, Nagy-Britannia). A projekt keretében célul tűzték ki egy virtuális, magyar nanotudományi központ létrehozását, amelynek a feladata a Magyarországon nanokutatással foglalkozó intézmények hálózatának kialakítása, a kölcsönös információcsere intézményes biztosítása, adatbázisok létrehozása, kutatócserék elősegítése, közös oktatási anyagok létrehozása és a magyar részvétel elősegítése a keretprogramban. Fontos feladat volt a kutatóintézetek és a nanotechnológiával foglalkozó vállalati szakemberek munkájának összehangolása, ami az ún. „Technological Transfer Day” rendezvények keretében történt. Nagy hangsúlyt helyeztek a hazai kis- és középvállalatok bevonására.

A hidrogénnek, mint a jövő környezetbarát üzemanyagának katalitikus tisztítása fontos feladat, és hozzájárul a „hidrogéngazdaság” kiépítéséhez, ami már Magyarországon is elkezdődött. A „Funkcionalizált határfelületek fejlesztése és alkalmazása specifikus biokémiai és kémiai rendszerekben” elnevezésű NKFP-projekt keretében a szénmonoxidnak hidrogénből történő szelektív eltávolítására alkalmas többfémes oxidhordozós katalizátorokat

fejlesztettek ki. A legjobb és legstabilabb katalizátornak az  $(\text{Al}_2\text{O}_3)$ -hordozós aranykatalizátorok bizonyultak, ólom, réz, cérium, szamárium bevitelét követően.

A Jedlik Ányos Program (Versenyképes ipar és agrárium) „Újgenerációs biohajtóanyagok (elsősorban biogázolaj) kifejlesztése” c. témájában a 2007. évi munka fontosabb eredményei a következők: a növényi olajok kinyerési technológiájának fejlesztése, új katalizátorok kifejlesztése, a növényolaj gázolajjá alakítása laboratóriumi és nagylaboratóriumi méretű kísérletekben katalitikus hidrokonzverzióval.

Az „Etilalkohol átalakítása aromás vegyületekké és hidrogénné” c. NKTH által támogatott kutatások 2007. évi munkájának legfontosabb eredménye annak megállapítása, hogy a szén-alapú hordozóra felvitt  $\text{Mo}_2\text{C}$ -on a metanol és etanol átalakulása a hidrogénfejlődés irányába megy végbe.

A GVOP „Új, szennyvíz- és iszapkezelésre alkalmas adalékanyag előállítás a rudabányai vasércdúsító meddőjének kémiai feldolgozásával” c. témájában félüzemi szintű berendezést konstruáltak, ami a szennyvíztisztításban flokkulálószerként alkalmazható vas(III)-klorid-tartalmú oldat gyártására alkalmas. A munkát az intézet koordinálja.

A „Felületi nanoszerkezeteken adszorbeált formák IR-, elektron-, foton- és ionspektroszkópiai módszerekkel” c. OTKA-témában elért eredményekről 22 tudományos publikációt jelentettek meg. Fontos eredményeket értek el a bimetallikus nanorendszerek jellemzése területén. Megállapították, hogy az (Au-Rh)-rendszer jelentős hatás fejt ki a PROX-reakcióban.

OTKA támogatás segítségével a „Mágneses ellenállást mutató perovszkitok és spinellek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával, mágneses és röntgendiffrakciós módszerekkel” c. témában elért eddigi eredményeiket három publikációban és egy előadásban foglalták össze.

A „Szerkezetváltozások hatása kondenzált fázisok szabadterefogatára: pozitronannihilációs vizsgálatok” c. OTKA téma 2007. évi kutatásainak során a gyógyszertechnológiailag fontos polimerekben az öregedés és a vízfelvétel hatásait vizsgálták pozitronannihilációs és hagyományos polimervizsgáló módszerek kombinációjával. A munka eredményeit a gyógyszeriparban tablettabevonatok tervezésénél alkalmazzák.

Az „EXCELL – Network of Excellence – to overcome the fragmentation of European research in multifunctional thin films (Network of Excellence)” (Projekt szám – 515703-2, 2005-2008) c. programban 13 intézmény vesz részt. A projekt célja egy európai kutatási hálózat létrehozása, illetve az európai kutatási erőfeszítések fragmentáltságának csökkentése a kemény, kopás- és korrózióálló, bioaktív és más „smart” nanostrukturált vékonyrétegek kutatásának területén. A projekt alapján létrejött hálózaton keresztül egy nemzetközi konferenciát szerveztek (1st International Conference on Functional Nanocoatings).

A „POLYCOND – Creating competitive edge for European polymer processing industry driving new added value products with polymer (Integral Project)” (Projekt szám – IP 515835-2, 2005-2009) c. projektben 20 intézmény vesz részt. A projekt célja az európai polimerfeldolgozó ipar olyan versenyképes ágazatának megteremtése, amely nagy értékű, vezetőképes polimertermékeket állít elő. A projektben a polimerekhez többféle adalékot, pl. jó elektromos vezető szén-nanocsövet adnak azért, hogy a célt el lehessen érni. Az iparban előállított szén-nanocső egyenletes eloszlata a polimer mátrixban nagyon nehéz feladat. A lehetséges megoldások egyike a szén-nanocső felületének fizikai vagy kémiai módosítása. A kutatócsoport felületmódosító eljárásokat dolgozott ki, amelyekkel különböző polimerekbe a szén-nanocső adalékolhatóvá tehető.

Az INTAS-Holistic Strategies For Chromate Replacement in Aluminium Surface Treatments and Protective Coatings (Projekt szám INTAS 04-80-7219, 2005-2008) c. projekt feladata olyan új, környezetbarát, korróziós védőrétegek kifejlesztése nagy szilárdságú alumínium ötvözetekhez, amelyek korrózióvédő és tapadásjavító hatással is rendelkeznek. Fontos szempont továbbá, hogy a védőréteg megakadályozza a rézben feldúsult katódos intermetallikus szemcsék környezetében az alumínium-mátrix lokális korrózióját is. Az elmúlt évben kidolgoztak egy foszfonátos eljárást, amely kedvező eredményeket adott.

A THINFILM-Characterisation of Thin Films on Rough Steel Substrates (Projekt szám – RFS-CT-2005-00048, 2005-2008) c. projekt célja az ipar (autógyártás, csomagolóanyag előállítás) számára fontos vékonyrétegek (0.5 és 1000 nm között) jellemzése, különös tekintettel a vékonyrétegek vastagságára, összetételére, az összetétel mélységbeli és oldalirányú változására és a szubsztrátok durvaságára. A kutatás eredményeként egy kiválasztott mintát hitelesítettek, továbbá kidolgozták a vékonyrétegek vizsgálati folyamatát, és referencia anyagokat készítettek.

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

1. Gergely A, Telegdi J, Mészáros E, Pásztai Z, Tárkányi G, Kármán FH, Kálmán E: Modification of multi-walled carbon nanotubes by Diels-Alder and Sandmeyer reactions, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 7(8): 2795–2807 (2007)
2. Alagta A, Felhösi I, Telegdi J, Bertóti I, Kálmán E: Effect of metal ions on corrosion inhibition of pimeloyl-1,5-di-hydroxamic acid for steel in neutral solution, *Corrosion Science* 49(6): 2754–2766 (2007)
3. Paszternák A, Stichleutner S, Felhösi I, Keresztes Zs, Nagy F, Kuzmann E, Vértes A, Homonnay Z, Pető G, Kálmán E: Surface modification of passive iron by alkyl-phosphonic acid layers, *Electrochimica Acta* 53: 337–345 (2007)
4. Margitfalvi JL, Tálas E, Zsila F, Kristyán S: Dimer formation of cinchonidine in liquid phase: relevance to the heterogeneous catalytic enantioselective hydrogenation of ethyl pyruvate, *Tetrahedron-Asymmetry* 18(6): 750–758 (2007)
5. Lónyi E, Valyon J, Gutierrez L, Ulla MA, Lombardo EA: The SCR of NO with CH<sub>4</sub> over Co-, Co,Pt-, and H-mordenite catalysts, *Applied Catalysis B-Environmental* 73(1-2): 1–10 (2007)
6. Wang J, Pásztai Z, Clarke ML, Chen X, Chen Z: Deduction of structural information of interfacial proteins by combined vibrational spectroscopic methods, *Journal of Physical Chemistry B* 111(21): 6088–6095 (2007)
7. Széchenyi A, Solyosi F: Production of hydrogen in the decomposition of ethanol and methanol over unsupported Mo<sub>2</sub>C catalysts, *Journal of Physical Chemistry C* 111, 9509–9515 (2007)
8. Németh Z, Homonnay E, Árva F, Klencsár Z, Kuzmann E, Vértes A et. al.: Response of La<sub>0.8</sub>Sr<sub>0.2</sub>CoO<sub>3-delta</sub> to perturbations on the CoO<sub>3</sub> sublattice, *European Physical Journal B*, 57, 257–263 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	68	Ebből kutató <sup>2</sup> :	53
PhD, kandidátus:	20	MTA doktora:	6
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	2
			16
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			75
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			73
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	39
nemzetközi együttműködés keretében:	21	SCI által regisztrált folyóiratban:	39
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	87,867	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	461
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			342
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	16
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	9	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	49	posztterek száma:	33
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	16	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	19
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			24
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	5	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	18	Gyakorlati kurzusok száma:	11
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát:	2
		PhD-t:	24
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			970
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			292,3 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	4	Teljes saját bevétel:	319,5 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			10,1 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	26,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			14
NKFP:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	149 MFt
Egyéb:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,3 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	50,3 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			8
EU forrásból:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,2 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,5 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			19
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	67,2 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

**Kémiai Kutatóközpont**  
**SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET**

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59–67., 1525 Budapest, Pf. 17.  
Telefon: 438–1120, Fax: 438–1100/276 m.  
e-mail: kubinyi@chemres.hu, honlap: www.chemres.hu

**I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Az Intézet alapvető feladata: nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a molekulák és a szupramolekuláris szerkezetek sajátosságainak különböző spektroszkópai és diffrakciós mérési módszerekkel, továbbá elméleti kémiai vizsgálatokkal történő feltárására.

Az intézet feladatai közé tartoztak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése. 2007-ben az intézet összetevékenységében jelentős hányadot képviselt a hazai, valamint a különböző európai projektekhez kapcsolódó, kémiai szerkezetkutatási feladatokban való részvétel is. A kutatóhely számos témában folytat meghatározó jelentőségű tudományos együttműködések a Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai és Felületkémiai és Katalízis Intézetével.

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

*Molekulaspektroszkópai kutatások*

Az elmúlt évben beszerzett multidetektoros mikroszkóp és hagyományos FTIR-spektroszkópai módszerek segítségével, a Budapesti XVI. kerületi Rendelőintézzel együttműködve, az emberi bőr és haj színképét vizsgálták. A közel 500 beteg adatait jelenleg dolgozzák fel kemometriai és egyéb eljárásokkal. A cél bizonyos betegségtípusok (pl. rákos megbetegedések) diagnózisához való hozzájárulás.

Új spektroszkópai módszert dolgoztak ki hét fontos légköri szennyező detektálására hosszúfényutas fotolízises cella alkalmazásával. A detektálási határokat közel egy nagyságrenddel sikerült csökkenteniük, pl. benzol és toluol esetében.

Meghatározták néhány, proteolitikus enzimeknek ellenálló D-aminosav szubsztituált *mucin-2* fehérje-epitóp (TPTPTGTQTPT) NMR-szerkezetét. Míg a *TPTPTGTQTPT* és *TPTPTGTQTPT* peptidok esetében (ahol a dőlt betűk a D-aminosavakat jelölik) az NMR-vizsgálatok rendezetlen szerkezetre utalnak, a *TPTPTGTQTPT*-származék a natív peptidhez hasonló, jól definiált  $\beta$ -kanyar szerkezetet mutat.

Ón(IV)- és aranytartalmú szupramolekuláris fémkomplexeket oldat és szilárd fázisú, multinukleáris NMR-módszerrel vizsgáltak. Szilárd- és oldatfázisú  $^{31}\text{P}$ -NMR mérések segítségével kétfémes komplexekben tanulmányozták az Au-Au aurofil kölcsönhatás dinamikáját és energetikáját.



Kimutatták, hogy a mikrokörnyezet és az ionpár-képződés alapvetően befolyásolja egy tumorellenes hatású alkaloid, a berberin, fotofizikai sajátosságait. Így e vegyület kiválóan alkalmazhatónak bizonyult fluoreszcenciás jelzőanyagként, például epesav aggregátumok szerkezetváltozásának követésére. Igazolták, hogy a cianidsoporttal szubsztituált indolin-származékok fluoreszcenciájának poláris, protikus közegben tapasztalható gyors kioltásáért a cianidsoport nitrogénjén keresztül kialakuló hidrogénhidas-komplexek a felelősek. Többféleképpen szubsztituált diaril- és tetraaril-porfirin származékok fotofizikai tulajdonságait határozták meg, elsősorban a fotodinamiás terápiában történő potenciális felhasználhatóságuk megítélése érdekében.

Biológiai rendszerek gyökös folyamataiban kulcsszerepet játszó reaktív oxigén specieszek, mindenekelőtt a szuperoxid szabad gyökök kimutatásában és vizsgálatában értek el jelentős előrelépést a Mito-DEPMPO szintetizálásával, amely egyfelől jelentősen megnöveli a csapdázott szabad gyökök élettartamát, másfelől lehetőséget nyit a szabad gyökök mitokondriumban való kimutatására.

A szuperoxid-gyökök molekuladinamikai vizsgálatára új spektrumfelület szimulációs eljárást dolgoztak ki.

*Kutatói kapacitás: 20 fő, ebből intézeti állományban: 16,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 90 M Ft, ebből pályázati forrás: 11,6 M Ft.*

#### *Kristály-, por és folyadékdiffrakciós kutatások*

Egykristályok, porok és folyadékok röntgenszórásának vizsgálatára új mérési és számítási technikákat vezettek be és alkalmaztak. A megfelelő mérésekhez képlemez-térdetektort alkalmaztak, ami világviszonylatban is úttörő eljárás.

Szilárd fázisú reakció megtörténtét igazolták cukor-só komplexekben.

Meghonosították a krisztallográfiai fázisprobléma megoldásának új módszerét, továbbfejlesztették a korlátozott felbontású szórással bíró anyagok szerkezetvizsgálatát. Szupramolekuláris átalakulások rendszerezésére alkalmazták a morfotrópia – izostrukturalitás antinómia módszerét.

Új típusú ionos – molekuláris rendszerek, ill. komplexek kialakítását kezdték meg, egyes esetekben nemes-, átmeneti-, ill. alkáli-fém komplexek létrehozásával együtt.

Hazai együttműködésben meghatározták a galliumhidroxid és a nagy töménységű nátriumhidroxid oldatainak szerkezetét röntgendiffrakcióval. Ilyen vizsgálatokat még nem írtak le az irodalomban. Az eredmények hatással lehetnek a gallátok ipari kezelési eljárásaira, és javíthatják az alumíniumgyártás technológiáját is.

Amerikai, valamint osztrák kutatókkal együttműködésben (TÉT-egyezmény keretében) folytatták egyes önszerveződő, szupramolekuláris rendszerek (makrociklusos platina- és aranykomplexek, nitrometán és metilénklorid oldatok) szerkezetének meghatározását, a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzését. Ezek módszertani szempontból is úttörő jelentőségű munkák. Környezetvédelmi jelentősége van a nitrometán folyadékszerkezetére vonatkozó vizsgálatainknak, amelyek kombinált módszerekkel (röntgen- és neutrodiffrakció, szimuláció) történtek.

*Kutatói kapacitás: 13 fő, ebből intézeti állományban: 13 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 85 M Ft, ebből pályázati forrás: 17 M Ft.*

#### *Tömegspektrometriai kutatások*

A tömegspektrometriai kutatások profilja egyre nagyobb mértékben a proteomikai biokémiai, valamint a bioinformatikai feladatok megoldása irányába tolódik el. Az elmúlt év legfontosabb eredménye, az AGP glikozilációs mintázatának meghatározása volt mintegy 70 egészséges és különböző rákos megbetegedésben szenvedő beteg esetén. Az eredmények kiértékeléséhez új szoftvert fejlesztettek ki. Vizsgálataik eredményei igazolják, hogy a glikozilációs mintázat jelentősen függ a rákos megbetegedés típusától. A felismerések (új tumor marker) lehetővé teszik egy szabadalom benyújtását is. A kifejlesztett szoftvert más kutatócsoportok számára is elérhetővé teszik.

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

#### *Elméleti kémiai kutatások*

A hidrogénatom (H) és az oxigénmolekula (O<sub>2</sub>) reakciójának dinamikai vizsgálatával megállapították, hogy az égésekben alapvetően fontos (H + O<sub>2</sub>)-reakcióban általában nem keletkezik HO<sub>2</sub> komplex, hanem a partnerek pillanatszerű ütközésben találkoznak, amelyben legtöbbször nem játszódik le reakció.

A Fe<sub>2</sub>(CO)<sub>9</sub> és a Co<sub>2</sub>(CO)<sub>8</sub> komplexekben a Ponc-féle átlagolt Fermi-lyuk analízis alapján megállapítható, hogy a komplexekben nem alakul ki direkt fém-fém kötés, hanem a két fématom közt a hídhelyzetű (CO)-csoportokon keresztül háromcentrumú kötés létesít kapcsolatot.

Előállítottak egy vízdoldható Fe(II)-porfirin komplexet. A komplex magjának oxigénfelvevő képességét vizsgálva megállapították, hogy az oxigén reverzibilis felvételét a víz koordinálódása megakadályozza. Ez az oka annak, hogy a hemoglobinban a vasatomot hidrofób környezet veszi körül.

A nem-adiabatikus effektusok figyelembevételével továbbfejlesztették a CH<sub>2</sub>BrCl-molekula disszociációjának koherens szabályozására kidolgozott eljárást, és hozzájárultak a halometán-molekulákon (CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>BrI) ultrarövid lézerpulzusokkal végzett időfelbontásos mérések eredményeinek értelmezéséhez.

Klasszikus, illetve Car-Parrinello molekuláris dinamikai szimulációs számítások segítségével, valamint diffrakciós (röntgen és neutron) mérések alapján jellemezték a folyadék fázisú nitrometán szerkezetét.

Új elméleti módszert javasoltak gerjesztett állapotok értelmezéséhez, amely lehetővé teszi a lokális gerjesztések "kinyerését" a delokalizált MO-k bázisában végzett CIS-számítások eredményeiből.

Tisztázták a lokális spin-négyzet fogalmát.

Általánosították a molekuláris viriál-tételt.

Kiterjedt piritmodelleken elvégzett kvantumkémiai számítások segítségével azonosították a vas Fe(IV) állapotát.

A széndioxid vízben való kémiai oldódásának részlépéseit *ab initio* molekuláris dinamikai szimulációs számításokkal tanulmányozták, és meghatározták az egyes lépésekhez tartozó aktiválási energiákat, illetve az egyensúlyi lépések szabadenergiáit.

Felmérték különböző DFT és *ab initio* kvantumkémiai módszerek alkalmazhatóságának határait organokatalitikus addíciós reakciók mechanizmusának leírására. Megállapították, hogy az eddig ismert funkcionálok közül csak a legújabban kifejlesztett meta-GGA típusú funkcionálok alkalmazhatók megbízhatóan. Megmutatták, hogy az SCS-MP2-módszer sikeresen alkalmazható viszonylag nagy rendszerekre is.

Kvantumkémiai számítások segítségével részletesen feltárták az etilén fémhez (Pd) kötődő karboxiláttal végbemenő addíciós reakciójának mechanizmusát. A számítások eredményeivel értelmezni tudták azt a kísérleti tapasztalatot, miszerint a keletkezett akrilátermék eliminációja sikeresen kivitelezhető.

*Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő, Becsült intézeti ráfordítás: 49 M Ft, ebből pályázati forrás: 7 M Ft.*

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

#### *Hazai kapcsolatok*

Az Intézetnek széles körű kapcsolatai vannak a hazai egyetemekkel és az MTA-támogatású kutatócsoportokkal. Mind a tudományos kutatási, mind az oktatási együttműködések jelentősek. Az együttműködés eredményességét a 2007-ben egyetemi kutatókkal közösen megjelent 29 tudományos publikáció is mutatja. Tevékenyen részt vállalnak az egyetemi oktatásban. Az Intézet 10 kutatója oktat rendszeresen különböző egyetemeken. Elsősorban a BME-vel alakultak ki kölcsönösen előnyös kutatási és oktatási kapcsolatok. Ebben fontos szerepet játszik az intézet és a BME közös lézerspektroszkópai laboratóriuma.

A BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével együttműködve sikeresen szimulálták, az IR-spektrum, a kvantumkémiai számítások és az egykristály röntgendiffrakciós szerkezet ismeretében, a hidrát és a vízmentes galluszsav teljes hozzárendelésű spektrumait.

A BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszékkel közösen végezték el teofillintartalmú molekulavegyületek és ko-kristályok előállítását, valamint TG/DTA-MS, TG-FTIR és szerkezeti vizsgálatát. Olyan teofillintartalmú kristályt állítottak elő, melyben a semleges, ill. ionos molekularétegek váltakoznak, szigetelő-vezető rétegeket alkotva. Az (R)- és (S)-1-(1-naftil)-etilammónium (R)-N-[1-(1-naftil)etil]oxalamát sók röntgendiffrakciós szerkezetét összehasonlították az (R)- és (S)-1-fenil-etilammonium (R)-N-(1-feniletil)oxalamát szerkezetekkel.

A BME Szerves és Szerves Kémiai Technológia Tanszékkel együttműködésben foszfin-oxidok kristályosítással való reszolválásának földerítéséhez, ko-kristályokat alkottak különféle foszfin-oxid származékok, valamint a TADDOL és származékai közt. E szerkezetek

a solvatáció és a molekuláris szubsztitúció különféle állapotait mutatják. Az említett témákban a BME-vel folytatott kutatások eredményeiről hat közös publikációban számoltak be.

A „Gázok FTIR-spektrometriai analízisének fejlesztése és alkalmazásai” c. témában (együttműködő partner: Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar, MÜKKI) három publikáció született a közös kutatások eredményeként.

A Pannon Egyetemmel (Veszprém) kialakított tudományos együttműködés során vizsgálható Fe(II)-porfirin komplex oxigénfelvevő képességét vizsgálták. Az eredményeket két közös publikációban foglalták össze.

„Az alkillánc szerepe a  $Zn_4O(RCO_2)_6$  komplexek szimmetriájában és szerkezetében (FTIR spektroszkópiai tanulmány)” c. témában (együttműködő partner: Szegedi Tudományegyetem Fizikai Kémiai Tanszék) egy közös közleményt publikáltak.

A Richter Gedeon Nyrt. részére ismeretlen eredetű szennyezéseket azonosítottak tömegspektrometriai módszerek segítségével.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet nemzetközi kapcsolatai rendkívül sokrétűek és eredményesek. A kutatólaboratóriumok a megfelelő szakterületek minden jelesebb kutatóhelyével kapcsolatban állnak. Számos meghívás és közös publikáció mutatja az együttműködések eredményességét. 2007-ben hét MTA-egyezményes, külföldi tanulmányutat tettek. Számos európai és amerikai egyetemmel alakítottak ki eredményes kutatási együttműködések. Kétoldalú akadémiai egyezmények keretében az intézet 17 kutatót fogadott a partner-intézményekből. A látogatók többsége előadást is tartott. Az intézet kutatói 44 előadást és 34 poszter-előadást tartottak nemzetközi konferenciákon.

Az „Egyszerű kénvegyületek XANES és rezgési spektroszkópiai szerkezetvizsgálata” c. téma eredményeiről (együttműködő partner: Department of Physical, Inorganic and Structural Chemistry, Stockholm University, Svédország) egy publikációt közöltek 2007-ben.

Az „Orientált molekulák tanulmányozása infravörös lineáris dikroizmus alapján, elméleti számítások segítségével” c. kutatások (MTA-BTA kétoldalú egyezmény; együttműködő partner: Institute of Organic Chemistry, BAS, Szófia, Bulgária) eredményeiről egy közös publikációban számoltak be 2007-ben.

„A rezgési spektrumok tanulmányozása kísérleti és kvantumkémiai számításos módszerekkel” c. téma keretében (együttműködő partner: Department of Physical Sciences, Helsinki University, Finnország) a kutatások eredményeiről közös publikációban számoltak be.

A „Reaktív oxigén specieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerintézmények: Université de Provence, Marseille, Franciaország; The Ohio State University, USA; Dept. Biophysics, Medical College of Wisconsin, Milwaukee, USA; Eindhoven University of Technology, Hollandia; University of Rosario, Argentína) egy közös folyóiratcikket közöltek 2007-ben.

A „H-hidas komplexek fotofizikája” c. téma eredményeiről, osztrák-magyar Tét-egyezmény keretében a Max F. Perutz Laboratories Department of Chemistry University of Vienna, Ausztria kutatóival egy közös folyóiratcikket jelentettek meg.

Az „Olefinok epoxidációja (ReO<sub>3</sub>)-alapú komplexek segítségével” c. témában (Tét-DAAD-egyezmény) egy közös publikáció jelent meg a Technical University München, Németország kutatóival.

Az „Új tulajdonságú anyagok a szupramolekuláris és szilárd fázisú kémiában” c. magyar-dél-afrikai Tét-együttműködés keretében (együttműködő partner: University of Cape Town) az  $\alpha$ -(4-piridil)benzohidrol származékainak polimorfizát is mutató kristályszerkezeteit határozták meg. Az egyik származék sósavas sójának szublimációját vizsgálva tapasztalt orientált kristálytranszformációt a parciális izostrukturalitás jelenségével magyarázták. Elkezdtek ciklodextrin gyógyszerhatóanyagokkal képzett zárványainak és polimorfjainak előállítását, szerkezet- és izostrukturalitás-vizsgálatát.

Napelem-cellák félvezető vékonyrétegének előállítására használt fém-tiokarbamid komplexek vizsgálatának során meghatározták a diklór-bisz(tiokarbamid-S)-cink(II) szerkezetét. Megállapították, hogy a bizonytalan tércsoportleírások közül a *Pnma* a helyes (együttműködő partnerek: Laboratory of Inorganic and Analytical Chemistry, Helsinki University of Technology és Department of Materials Science, Tallinn University of Technology). Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

Előállították a citotoxikus arilpirazol ligandum 1,2-bisz[(1,3-difenilpirazol-4-il)metil]diaminoetánt és Cu-komplexeit; meghatározták a szerkezeti jellemzőket. (Együttműködő partner: Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg, Szerbia.) Az eredményeket közös folyóiratcikkekben foglalták össze.

Arany szolvatációját tanulmányozták poláros és nempoláros oldószerekben magyar-osztrák Tét-együttműködés keretében (együttműködő partner: University of Innsbruck, Institute for Ion Physics). Az igen eredményes együttműködést egy megjelent és három beküldött publikáció igazolja.

Román-magyar Tét-együttműködés keretében folytatták biológiai és orvosi minták tömegspektrometriai eredményeinek összehasonlító elemzését.

Argentín-magyar Tét-együttműködés során természetes gombaölő anyagokat és származékaikat jellemezték tandem-tömegspektrometriás módszerekkel.

Ukrán TA-MTA kétoldalú megállapodás keretében biomolekulák tömegspektrométerben végbemenő elemi reakcióit modellezték.

MTA-CNR egyezményes kutatások keretében (együttműködő partner: University of Bari) első ízben sikerült egy olyan reakciót megvalósítani, melyben a széndioxid olefinokkal reagálva akrilát termékeket ad, és azok a fémcentrumtól eliminálódnak. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

Magyar-spanyol Tét-egyezmény keretében (együttműködő partnerek: Department of Chemistry és Institute of Computational Chemistry, University of Girona) a "fuzzy atomos" energiabontás DFT-általánosítását végezték el, az energiakomponenseket analizálták, különös

tekintettel a kicserélődés és kicserélődési potenciál térbeli eloszlására. Az együttműködésből közös publikáció született.

A University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA kutatóival folytatott együttműködési téma (A H-atom és az O<sub>2</sub>-molekula reakciójának dinamikai vizsgálata) eredményeiből 2007-ben hét publikációjuk jelent meg.

Az Institute for Chemical Process Fundamentals, Czech Academy of Sciences intézménnyel végzett közös kutatások (Dinukleáris vas- és kobaltkarbonilok kötéstermeszetének vizsgálata) eredményeit közös publikációban foglalták össze.

A „Halometán-molekulák fotokémiájának vizsgálata elméleti módszerekkel” c. téma eredményeként meghatározták a CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub><sup>+</sup> kation gerjesztett elektronállapotait; értelmezték a CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub> és CH<sub>2</sub>BrI molekulákon végzett femtoszekundumos időfelbontású méréseket. Az Institute of Physical Chemistry, Friedrich Schiller University Jena, Németország és a Department of Physics and Astronomy, Stony Brook University, New York, USA intézményekkel folytatott együttműködés eredményeit közös publikációban foglalták össze.

Egy „ab initio molekulamechanikai módszer” létrehozásának lehetőségéről (téma: geminál-hullámfüggvény energiaképlete átfedő bázis esetére, a létrehozandó módszer elvi alapjainak előzetes felvázolása) folytatott diszkussziók eredményeként (együttműködő partner: Karpov Institute of Physical Chemistry, Moszkva) közös folyóiratcikket publikáltak.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A „Hatóanyag-tervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján” (NKFP 1A005/04) c. program „Gyógyszerjelölt molekulák fototoxikus sajátságának előrejelzése” c. témájában fotodinamikus terápiában használható fotoszenzibilizátorokat minősítettek fototoxicitás szempontjából, valamint cianid-szubsztituált indolin-származékok fluoreszcencia-kioltásának okát határozták meg. Az említett program „Potenciális hatóanyagok fluoreszcenciás vizsgálata” c. témájában kimutatták, hogy a berberin természetes izokinolin-vázú alkaloid nemcsak számos kedvező biológiai hatást mutat, hanem fluoreszcenciás jelzőanyagként is kiválóan alkalmazható. Feltárták továbbá az 1-alkil-3-metil-imidazolium-bromid ionfolyadék-micellák sajátságait. Elvégezték továbbá a reaktív oxigén specieszek közé tartozó szuperoxid gyök dinamikai vizsgálatát spin-csapdázott állapotban. A hőmérsékletnek a gyök mozgékonyására való hatását is vizsgálták. Kétdimenziós spektrumszimulációkat végeztek a termodinamikai paraméterek meghatározása érdekében.

Az OTKA T-046953 sz. szerződés „Szabad gyökök termodinamikai paramétereinek meghatározása ESR-spektroszkópiával biológiai és modell rendszerekben” c. témájában az enzimatikusan képződő karbonilgyökök kimutatására a DMPO ciklikus nitron vegyületet alkalmazták. Felderítették a csapdázott karbonilgyökök átalakulási folyamatait. Kifejlesztettek egy új csapdát, a mito-szubsztituált ciklikus nitronokat, amik megháromszorozzák a csapdázott szuperoxid-gyökök élettartamát. A módszert egyéb reaktív oxigén specieszek és tiil szabad gyökök kimutatására is alkalmazták. A DEPMPO-nitron által csapdázott szuperoxid-gyök kémiai cseréjét az általuk kifejlesztett új, kétdimenziós

szimulációs technikával értelmezték, és meghatározták termodinamikai paramétereit. Leírták a két geminális foszforral szubsztituált lineáris nitroxid szabad gyök kémiai cserefolyamatait.

OTKA-pályázat támogatásával 2007-ben előállították a trimetilón(IV)-benzoátot, és vizsgálták a vegyület melegítésre végbemenő *kristály-olvadék-kristály* átalakulását. Megállapították, hogy hő hatására metilcsoport vándorlásával járó diszmutációs reakció megy végbe, az olvadékból egykristályok válnak ki, valamint hogy a diszmutációs bomlás olvadékban sokkal gyorsabban megy végbe, mint folyadékfázisban. A röntgendiffrakciós szerkezet a diszmutációs reakciónál eddig még nem megfigyelt tetraorgano-disztannoxánt azonosított.

Az „Önszerveződő fémorganikus vegyületek szintézise és szerkezeti jellemzése” c. OTKA téma keretében a  $[Pd(N-N)]^{2+}$  sarokelemek ligandumjának térigényét számszerűen leírták. Kimutatták, hogy e kationok 4,4'-bipiridinnel való kölcsönhatása trimer/tetramer egyensúly kialakulására vezet, azaz az oldatban  $[Pd(N-N)(4,4'-bpy)]_n^{2n+}$  kationok vannak jelen ( $n = 3, 4$ ). Az új ligandumok komplexképző sajátosságainak felderítésére vizsgálatokat végeztek, két kelátképző helyet, valamint véghelyzetű donoratomot és kelátképző helyet egyidejűleg tartalmazó ligandumokkal.

A Jedlik Ányos program keretében a „Molekuláris célpontok és biomarkerek azonosítása kóros elhízás mechanizmusában és gyógyításában” c. témakörben értek el fontos eredményeket a folyamatban szerepet játszó molekulák felderítésével.

A „Biomolekulák szerkezetének és kölcsönhatásainak vizsgálata informatikai és tömegspektrometriai módszerek együttes alkalmazásával” c. OTKA-téma kutatásaiban a tavalyi év folyamán folytatták különböző modell-peptidek tandem tömegspektrometriás vizsgálatát QQQ és ioncsapda típusú készülékeken. Ezeket a kísérleteket Q-TOF és FT-ICR készüléktípusok alkalmazásának irányában is kibővítették. Részletesen vizsgálták a tandem tömegspektrumok energiafüggését. Vizsgálataik kiterjedtek a glikopeptidekre is.

Megállapították, hogy ioncsapda és FT-ICR készüléktípusok esetén az ütközéses aktiváció mellett a radiatív folyamatoknak (spontán fotonemisszió, ill. abszorpció) igen jelentős hatása van a fregmentációra. A világon elsőként új módszert dolgoztak ki a radiatív hűlés és az ütközéses aktiválás egyidejű meghatározására. A módszert YGGFL modellpeptid esetén a gyakorlatban is alkalmazták és publikálták. A peptidfragmentáció elméleti leírása során megállapították, melyek azok a fizikai-kémiai paraméterek, amelyek ezt a legnagyobb mértékben meghatározzák. Új, számítógépes programot fejlesztettek ki a paramétereknek az optimalására. Az így kapott paraméterek alkalmazásával és egy újabb szoftver kidolgozásával, lehetővé vált a peptidek tandem-tömegspektrumának elméleti (prediktív jellegű) meghatározása.

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

1. Tárkányi G, Király P, Pálinkás G, Deák A: Conformational analysis of a helically distorted gold(I) macrocycle derived from xantphos: evidence for the aurophilic Au...Au interaction from NMR, *Magnetic Resonance in Chemistry* 45(11): 917–924 (2007)

2. Pál K, Kállay M, Köhler G, Zhang H, Bitter I, Kubinyi M, Vidóczy T, Grabner G: Efficient singlet-state deactivation of cyano-substituted indolines in protic solvents via CN-HO hydrogen bonds, *Chemphyschem* 8(18): 2627–2635 (2007)
3. Hardy M, Chailer F, Ouari O, Finet JP, Rockenbauer A, Kalyanaraman B, Tordo P: Mito-DEPMPO synthesized from a novel NH<sub>2</sub>-reactive DEPMPO spin trap: a new and improved trap for the detection of superoxide, *Chemical Communications* (10): 1083–1085 (2007)
4. Deák A, Tunyogi T, Tárkányi G, Király P, Pálinkás G: Self-assembly of gold(I) with diphosphine and bitopic nitrogen donor linkers in the presence of trifluoroacetate anion: formation of coordination polymer versus discrete macrocycle, *Crystengcomm* 9(8): 640–643 (2007)
5. Czugler M, Körtvélyesi T, Fábián L, Sipos M, Keglevich Gy: Intra- and intermolecular interactions and water pincer in the crystal structure of a 3-P(O)Ph-2 substituted 1,2,3,6-tetrahydrophosphinine oxide hydrate, *Crystengcomm* 9(7): 561–565 (2007)
6. Rokob TA, Hamza A, Pápai I: Computing reliable energetics for conjugate addition reactions, *Organic Letters* 9(21): 4279–4282 (2007)
7. Peltz Cs, Drahos L, Vékey K: SORI excitation: Collisional and radiative processes, *Journal of the American Society for Mass Spectrometry* 18(12): 2119–2126 (2007)
8. Stirling A, Bernasconi M, Parrinello M: Defective pyrite (100) surface: An ab initio study, *Physical Review B*, 75(16): 165406-1–165406-8 (2007)
9. Van Wyngarden AL, Mar KA, Boering KA, Lin JJ, Lee YT, Lin SY, Guo H, Lendvay Gy: Nonstatistical behavior of reactive scattering in the O-18+O-32(2) isotope exchange reaction, *Journal of the American Chemical Society* 129(10): 2866–2870 (2007)
10. Megyesi M, Biczók L: Berberine alkaloid as a sensitive fluorescent probe for bile salt aggregates, *Journal of Physical Chemistry B* 111(20): 5635–5639 (2007)



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	51	Ebből kutató <sup>2</sup> :	46
PhD, kandidátus:	10	MTA doktora:	14
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	2
			16
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			97
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			97
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	83
nemzetközi együttműködés keretében:	45	SCI által regisztrált folyóiratban:	83
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	218,24	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	1769
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1368
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	2
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	3
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	44	posztterek száma:	34
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			12
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	11	Gyakorlati kurzusok száma:	9
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	15
			557
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			339,9 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	5	Teljes saját bevétel:	111,6 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			14
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	28,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			8
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	50,8 MFt
Egyéb:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	14,1 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,4 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			23
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	16,3 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Az intézetben 2007-ben főként olyan komplex kutatási témákat műveltek, amelyekben az anyagtudományi és környezeti kémiai vonatkozások együtt, egymást kiegészítve jelentek meg.

Modern kísérleti és elméleti módszerekkel tanulmányozták célszerűen kiválasztott funkcionális és szerkezeti anyagok kémiai és szerkezeti jellemzőit, az ezek kialakulásához vezető folyamatokat, és befolyásolásuk lehetőségeit. Környezeti kémiai kutatásaik fő célja a természeti környezet terhelésének csökkentésére irányuló eljárások és termékek fejlesztésének tudományos megalapozása volt.

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

### *Anyagkémiai kutatások*

#### Nanorétegek előállítása és vizsgálata

Ultranagy molekulatömegű polietilén felületét módosították nitrogén plazmában, plazmaimmerziós ionimplantációval, különböző gyorsítófeszültség, részecske dózis és dózisteljesítmény mellett. A változásokat XPS, Raman-spektroszkópiai, nanomechanikai és nanotribológiai módszerekkel vizsgálták. Megállapították, hogy kezelés során az anyag dehidrogéneződött, a réteg tömörödött, és hidrogénezett, amorf szénitrid-szerű réteg képződött. Eközben a felületi rétegbe 13–20 at%-nyi, többféle kémiai állapotú nitrogén épült be. A módosított réteg keménysége mintegy négyszerese a kezeletlen polietilén keménységének, jellemző kopási térfogata pedig mintegy negyede annak. A kutatási eredményeket már alkalmazzák növelt élettartamú humán csípőízületi protézisek gyártásánál.

Újságpapír felületét kezelték atmoszférikus, nagy teljesítmény-sűrűségű, kis hőmérsékletű, ún. diffúz koplánáris, felületkorlátozott plazmakisülési módszerrel. XPS vizsgálataik szerint a nitrogénplazmás kezelés nagyobb mértékű oxidációt eredményezett, mint a levegőplazmás. Az oxigén főleg C=O és C-O típusú kötésekbe épült be. Az eltéréseket imin-csoportok átmeneti képződésével és hidrolízisével értelmezték. Ezeket az eredményeket a nyomdaiparban lehet felhasználni.

*Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8,4 M Ft, ebből pályázati forrás: 4,2 M Ft.*

### Mikro- és nanoszerkezetű, funkcionális társított rendszerek előállítása

Új, fehérje hatóanyagot tartalmazó, szabályozott leadású gyógyszerformátumokat fejlesztettek ki, szerves és szervetlen alapú, nanoszerkezetű kompozit hordozórendszerekre alapozva. Ezek a készítmények komfortosabb és kisebb terheléssel járó gyógyszeradagolást tesznek lehetővé. Az új gyógyszer típust – a megfelelő preklinikai és erre épülő hatásági vizsgálatokat követően – a Trigon Biotechnológia Zrt. kívánja gyártani és forgalmazni.

Nanoszerkezetű biokatalizátor hordozóként használható kitozán mikrogömbök emulziós térhálósítással történő előállításakor vizsgálták a kísérleti körülmények hatását a keletkezett részecskék méreteloszlására és átlagméretére, valamint enzim megkötő-képességére, és az előállított hordozós biokatalizátor aktivitására.

Az intézetben kidolgozott újszerű módszerrel, RF termikus plazmában, nanoszerkezetű, többkomponensű hidrogénező katalizátorokat állítottak elő egy lépésben.

Mikro- és nanoszemcsékből álló, különleges morfológiájú és szerkezetű nikkkel-cink ferrit porokat állítottak elő őrléssel, oldatból kicsapással, valamint RF termikus plazmában történő szintézissel. Vizsgálták a kapott termékek alkalmazhatóságát tekercselt induktivitásokban. Az eredményeket az EPCOS Elektronikai Alkatrész Kft. fogja alkalmazni. A termikus plazmában előállított Ni-Zn-ferrit nanorészecskék alkalmazhatóságát vizsgálták hisztidin tartalmú fehérjék tisztítására is.

Mikrohullámú technológiákban alkalmazható nanoporokat ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$ , SiC, ferritek) és nanokompozitokat állítottak elő egy nemzetközi projektben. A nanoporok alkalmazástechnikai vizsgálatait az együttműködő hazai és külföldi partnerek végzik. Fémek kerámia réteggel történő bevonásához plazmaszóró berendezést terveztek és helyeztek üzembe. Alakemlékező szintézissel szénszálakból szilícium-karbid nanoszálakat állítottak elő. Az általuk előállított porokhoz és szálakhoz hasonló morfológiájú anyagok kereskedelmi forgalomban nem kaphatók.

*Kutatói ráfordítás: 9 fő, ebből intézeti állományban van: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 117 M Ft, ebből pályázati forrás: 105,3 M Ft.*

### Permanganátok és poligalakturonátok szintézise és vizsgálata

A bárium-permanganátot széles körben használják fel, pl. szelektív oxidációs reagensként egyes szerves kémiai szintéziseknél. Megbízható és jó kitermelést adó előállítási módja azonban a mai napig nincs. Kálium-permanganátból kálium-jodid segítségével, bárium-klorid és nátrium-hidroxid jelenlétében bárium-manganátot állítottak elő, amely szén-dioxid hatására, 100°C-on, víz jelenlétében 1,5 óra alatt átalakult bárium-permanganáttá. A bárium-permanganátból kiindulva más permanganát-sókat (Zn, Cd, Cu, Mg, Ca, Ni, Al, Fe, Ce) is elő lehet állítani.

A vashiányos állapot kezelésére alkalmas vas-poligalakturonátból a vas felszívódása és hasznosulása sok tényező függvénye, így pl. a vas oxidációs állapota és koordinációja is befolyásolja. Az intézetben vizsgálták a poligalakturonátok szerkezetét abból a célból, hogy különböző vastartalom mellett információt szerezzenek a vas mikrokörnyezetéről, valamint a Fe(II) és a Fe(III) oxidációs állapotok arányáról. Mössbauer spektroszkópiai és ICP-OES vizsgálataik egyértelműen azt mutatták, hogy a vegyületekben két fő Fe(II) mikrokörnyezet létezik. A Mössbauer vizsgálatok igazolták a vas beépülését is a vas-poligalakturonát komplexbe. Valamennyi vas-poligalakturonát vegyületben a vas főként Fe(II) oxidációs állapotban fordult elő. Ez igen fontos eredmény, mivel az emberi szervezet a Fe(II)-t jobban

fel tudja venni és hasznosítani, mint a Fe(III)-t. Az előállított poligalakturonátok gyógyhatású készítmény formájában kereskedelmi forgalomba kerültek.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 4 M Ft, ebből pályázati forrás: – M Ft.*

#### Korszerű elektrokémiai vizsgálati módszerek fejlesztése és ezek gyakorlati alkalmazása

Modellt dolgoztak ki a perklorátionok elektroszorpciójának és ródiomon lejátszódó elektrokémiai redukciójának kinetikai leírására. A modell alapján jól lehetett értelmezni az elektrokémiai mérések eredményeit. Kimutatták, hogy hidrogén WO<sub>3</sub> felületen való adszorpciója, illetve az ezzel kapcsolt hidrogéntranszport esetében a rendszer impedanciája jó összhangban van az ún. „diffusion-trapping” modellel. Elemezték a szilárd elektródok felületi energiájának mérésével kapcsolatos újabb eredményeket.

Ir(210) és Rh(111) és a platinacsoportba tartozó más fémek egykristályain is végeztek elektrokémiai vizsgálatokat. Impedancia mérésekkel kimutatták, hogy a határfelületen kialakuló elektromos kettősréteg töltése még az ún. kettősréteg-tartományban is elsősorban az adszorbeált anionok töltéséből áll; az impedancia-spektrumok arra adnak felvilágosítást, hogy ezen anionok milyen sebességgel mozognak a külső- és a belső Helmholtz sík között. Megmutatták, hogy megfelelő körülmények között impedancia mérésekkel az anionok és a hidrogénionok adszorpciója külön-külön jellemezhető.

Kimutatták, hogy a platina előfeszültséggel válik le aranyfelületen. Meghatározták az előfeszültség értékét, az elektrokémiai platina-adszorpció potenciáltartományát, és az adszorbeálódó platinaatomok helyigényét. Megállapították, hogy elektrokémiai úton előállítható egyetlen platina réteggel borított aranyfelület is.

Tovább fejlesztették a molekuláris elektronikában és nano-elektrokémiában használható nagy felbontású (~5fA), nagy dinamikájú (9-12 nagyságrend), gyors tranziensek rögzítésére alkalmas árammérési módszereket.

A savas közegben történő hidrogénfejlődés kinetikáját elektrokémiai zaj alapján vizsgálták. A Volmer-Heyrovsky mechanizmus alapján megmutatták, hogy kellően nagy túlfeszültségen a látszólagos töltésszám-változás a hidrogénborítottságtól függő, 1 és 2 közötti szám. Ezüst és réz mikroelektródokon végzett mérések során az elmélettel jó egyezést kaptak.

Impedancia spektroszkópia módszerrel vizsgálták környezetbarát, vízzel hígítható festékgyantákból kialakított filmek vízfelvételek mechanizmusát, és meghatározták a gyantafilmek elektromos paramétereinek változását vízfelvétel hatására.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 35 M Ft, ebből pályázati forrás: 6,4 M Ft.*

#### Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók és alkalmazásuk

Az amfifil polimer kotérhálók (AKT) kapcsolatos kutatásaikban a poli(N-vinil-imidazol) alapú AKT-k fémion-megkötését tanulmányozták. Megállapították, hogy az előállított poli(N-vinil-imidazol)-1-poli(tetrahidrofurán) (PVI-1-PTHF) nanofázisú morfológiával rendelkezik. Fémion-megkötő tulajdonságukat szilárd fázisú <sup>13</sup>C-NMR-rel és ICP-OES módszerrel vizsgálták. A polimer-fémion komplex rendszerek transzmissziós elektronmikroszkópiai vizsgálata egyértelműen igazolta, hogy különleges, nano-hibrid anyagok képződtek.

Új atomerő mikroszkópos (AFM) felvételeket készítettek a poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliizobutilén amfifil polimer kotérhálóról a teljes összetétel-tartományban. Megállapították, hogy a térhálókat alkotó fázisok minden esetben igen szűk méreteloszlásúak.

Nemzetközi együttműködésben különböző metakrilsav (MAA) alapú AKT-kat állítottak elő, melyekben a hidrofil PMAA-tartalom mellett a hidrofób polimer minőségét és mennyiségét változtatták. Hidrofób monomerként metil-metakrilátot (MMA), butil-oktil-metakrilátot (BOMA), valamint poliizobutilén-metakrilátot (PIBMA) alkalmaztak. Vizsgálataik új összefüggéseket szolgáltatnak a kotérháló kémiai szerkezete, összetétele és tulajdonságai között.

*Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 8,5 M Ft.*

#### Újszerű polimerek előállítása

Kvázielő karbokationos polimerizációval szabályozható tulajdonságú polimereket állítottak elő. Az izobutilén polimerizációs mechanizmusának kutatása során vizsgálták a protoncsapdának a vegyületek polimerizációjára kifejtett hatását. Megállapították, hogy protoncsapda jelenlétében a poliizobutilén láncok összekapcsolódásának mértéke – a vártól eltérően – maximum görbe szerint változik a katalizátor koncentráció növekedésével.

Több éve folytatnak kutatásokat láncvégi funkciós csoportokat tartalmazó poliizobutilének környezetkímélő előállítására. Az elmúlt évben vizsgálták a különböző olefin végcsoportú poliizobutilének oxidatív láncvég-módosítását ózonnal. Az eljárások során karboxil és aldehid funkciós csoportokat sikerült kialakítani.

A makromolekuláris tervezési eljárásokkal olyan polimerek előállítására nyílik lehetőség, amelyek tulajdonságai felülmúlják számos eddig használt polimer fizikai és kémiai tulajdonságait. A korábbi években új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására. Ezek folytatásaként 2007-ben olyan hiperelágazásos kopolimereket állítottak elő kvázielő gyökös polimerizációval, amelyek fontos gyakorlati jelentőségűek lehetnek. Az egyik alkalmazási terület különleges fogtömő anyagok előállítása kereskedelmi forgalomban kapható monomerekből. Az e területen szerzett tudást az intézet a DuPont Co. amerikai vállalattal több éve tartó kutatási együttműködésben is kamatoztatja.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 24 M Ft, ebből pályázati forrás: 3,5 M Ft.*

#### Poliolefinek degradációja és stabilizálása

A különböző katalizátorokkal gyártott polietilén és polipropilén lebomlását és stabilizálását befolyásoló tényezőket tanulmányozták a termékek feldolgozási és alkalmazási körülményei között. Vizsgálták, hogy a polietilén alapanyagokban levő katalizátormaradékok milyen szerepet játszanak a polimerek lebomlásában. Tanulmányozták továbbá a különböző adalékok (antioxidánsok, savmegkötők) hatását a polimer feldolgozása során lejátszódó kémiai folyamatokra. Összefüggést állapítottak meg a poliolefinek gyártástechnológiai paramétereit, az adalékok összetétele és a polimer kémiai szerkezete között.

Poliolfineknél – modellkísérletekkel – vizsgálták a foszfortartalmú antioxidánsok kémiai szerkezete és hatásmechanizmusa közötti összefüggést a feldolgozási körülményei között. Polietilén csövek esetében összefüggést állapítottak meg az adalékok hidrolitikus stabilitása, valamint a különböző antioxidáns rendszerek hatékonysága között. Fröccsöntött polietilén

termékekben használt különböző fénystabilizátorok kémiai szerkezete és hatékonysága között is összefüggést állapítottak meg. Elemezték továbbá az adalékok közötti kölcsönhatás szerepét a hatékonyságban.

Propilén/etilén kopolimerekben vizsgálták különböző adalékok hatását a polimer organoleptikus tulajdonságaira. A kutatást a TVK-val, mint poliolefin gyártóval és a Clariant Huningue céggel, mint adalékgyártóval együttműködésben végezték. A kutatás eredményeit a TVK közvetlenül hasznosítja a különböző poliolefin adalékrendszereinek kidolgozásában.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: – M Ft.*

#### Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszerek

Tanulmányozták a különböző polimerek és társított rendszerek szerkezet-tulajdonság összefüggéseit és a terhelés hatására végbemenő deformációs folyamatokat. Külső feszültség hatására a kompozitokban mikromechanikai deformációs folyamatok indulnak meg. Akusztikus emisszióval és a térfogati deformáció módszerével vizsgálták e folyamatokat. Megállapították, hogy a töltőanyagot tartalmazó kompozitokban a határfelületek elválása az uralkodó részfolyamat. Több társított rendszerben (nanokompozit, faliszt erősítésű anyagok) azonban egyéb mechanizmusok, pl. az erősítő anyag törése, a mátrixból történő kihúzóódása is előfordulhatnak. További vizsgálatokat végeztek és jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Vizsgálták a feldolgozási körülményeknek a rétegszilikát eloszlására és exfoliációjára gyakorolt hatását. A kapott eredmények azt mutatták, hogy bár a feldolgozási paramétereknek a kompozit tulajdonságaira gyakorolt hatása a vártnál kisebb, de a maximális delaminációt biztosító feldolgozási paraméterek meghatározhatók. Saját és irodalmi adatok elemzésével megállapították, hogy a jelenleg használt megközelítéssel csak kismértékű, legfeljebb 10%-os exfoliáció érhető el. Ennél nagyobb mértékű exfoliációnál – a feldolgozási paraméterek hatása mellett – a komponensek közötti kölcsönhatásokat is figyelembe kell venni. Jelentős erőforrásokat fordítottak a természetes erősítőanyaggal módosított, illetve biológiailag részben vagy egészben lebontható polimerek vizsgálatára is.

*Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 12 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,4 M Ft.*

#### *Környezetkémiai kutatások*

##### Légkörkémiiai kinetika és fotokémia

Kifejlesztettek egy újszerű, lézerspektroszkópiai detektálást alkalmazó kinetikai mérési eljárást, amellyel az acetyl-gyök és acetyl-gyök oxigénmolekulával végbemenő elemi reakcióját tanulmányozták. Megállapították, hogy a két szabadgyök lényegesen eltérő módon reagál O<sub>2</sub>-nel, ami ellentmond a légkörkémiában szokásos feltételezésnek. Az acetyl-gyök és az oxigén közötti reakció – kémiai aktiválással – hidroxil-gyököt szolgáltat kis nyomásokon, míg a acetyl-gyök és az oxigénmolekula kölcsönhatása a nyomásfüggő asszociációs reakciók sajátosságait mutatja. Az eltérő kinetikai viselkedést a köztiterméként keletkező, gerjesztett peroxil-gyökök továbbalakulásának eltérő molekuláris mechanizmusával magyarázták.

Nagyérzékenységű környezetanalitikai módszerek kifejlesztésének tudományos megalapozása céljából fotofizikai alapkutatásokat végeztek folyadékfázisban. Megállapították, hogy a kettős

lumineszcenciát mutató 4-dimetilamino-piridin töltésátviteli állapotához tartozó fluoreszcencia intenzitása alkoholokkal történő komplexképződés hatására megerősödik, és a gerjesztett állapot dipólusmomentuma jelentősen megnő. Új, a korábbi irodalmi adatnál lényegesen alacsonyabb dipólusmomentum értéket határoztak meg az alapvető fontosságú 4-dimetilamino-benzonitril molekula triplett gerjesztett állapotára.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 38 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft.*

#### Műanyag hulladékok kezelésével és polimerek környezetileg előnyösebb előállításával kapcsolatos kutatások

Tanulmányozták a műanyagiparban nagy mennyiségben használt ólom-sztearát hőstabilizátor és a 2,6-di-terc-butil-4-metilfenol antioxidáns hatását a PVC oxidáló körülmények között bekövetkező hőbomlására. A folyamatot oldószerben vizsgálták, mert így az egyedi reakciók jobban nyomon követhetők, mint szilárd minták esetén, és a térhálósodás helyett a láncszakadás kerül előtérbe. Oldószerként 1,2,4-triklór-benzolt és dioktil-ftalátot alkalmazták. Előbbi gyakran alkalmazott apoláris közeg polimerek vizsgálatánál, utóbbi a PVC gyakran használt lágyítószer. Eredményeik azt mutatják, hogy mindkét adalék esetén kidolgozható egy enyhe termooxidatív eljárás, melynek során a poli(vinil-klorid) hulladékból értékes másodlagos termék hozható létre. Így a PVC hulladékot környezetileg előnyös módon lehetne feldolgozni.

Foszfortartalmú szervesetlen és szerves égésgátló adalékok hatását tanulmányozták elektronikai hulladékok jellemző műanyag komponenseinek (polikarbonát, vinil-polimerek és – kopolimerek) hőbomlására. Megállapították, hogy a szerves foszfit égésgátló nem befolyásolja a polimerek hőbomlását. Az illékony termékek között azonban megjelennek az égésgátló szerves csoportjaiból származó alkil-fenolok. A szerves foszfátok jelentős mértékben elősegítik a polimerek elszenesedését, és hátráltatják a magas hőmérsékleten lejátszódó, illékony termékek képződésére vezető gyökös kémiai reakciókat. Polikarbonátokban a foszfátok a karbonát csoport részleges hidrolízisét idézik elő, így a bomlás már alacsonyabb hőmérsékleten bekövetkezik.

A környezetszennyezés mértékének csökkentése érdekében kutatásokat végeztek polimerek környezetileg előnyösebb előállítására. Sikeresen állítottak elő polisztirolt benzotrifluorid oldószerben, amely kevésbé illékony, mint az eddig alkalmazott, környezetre káros diklórmetán.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 26 M Ft, ebből pályázati forrás: 1 M Ft.*

#### Biomassza anyagok hasznosításának kutatása termikus módszerekkel

Faipari és bútorigipari hulladékok, energiaültetvényről származó termékek, valamint mezőgazdasági és élelmiszeripari melléktermékek hőbomlását vizsgálták. A szervesetlen anyagokat és a kioldható komponenseket előzetesen eltávolítva tanulmányozták a komponensek hőbomlásra gyakorolt hatását. Kísérleteikkel igazolták, hogy az extrahálható anyagok (zsírsavak és fitoszterolok) könnyebben meghatározhatók termikus hidrolízissel és metilezéssel összekapcsolt gázkromatográfia-tömegspektrometria módszerrel, mint a hagyományos módszerekkel. A minták termikus viselkedésének összehasonlítására főkomponens elemzést végeztek, amelynek segítségével korrelációkat találtak a különféle kísérleti adatok között. Nagy teljesítményű reakciókinetikai kiértékelő módszereket

fejlesztettek és alkalmaztak, melyekkel az eddigieknél pontosabban leírhatók a minták hőbomlásakor lejátszódó folyamatok.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft.*

#### Anyag- és energiatakarékos technológiák talaj-, víz- és levegő tisztítására

Folytatták a modell-számításokat a napenergiás sótalanító rendszer hőtani és fluidmechanikai jellemzésére a legkedvezőbb geometriai és fluidmechanikai megoldások kialakítása, valamint a hő- és anyagtranszport intenzívebbé tétele céljából. Az együttműködő olasz iparvállalat (ECOS S.R.L., Cagliari) területén az intézet munkatársai által telepített ipari modul folyamatosan gyártja a desztillált vizet a vállalat belső igényeinek kielégítésére.

A 2005-ben, OMFB-támogatással épített 50 m<sup>3</sup>/nap kapacitású kombinált napenergiás fotokatalitikus és sztrippeléses víztisztító üzem technológiai egyszerűsítése és gazdaságosságának javítása céljából az eddigiekben használt szuszpendált TiO<sub>2</sub> (anatáz) fotokatalizátort a reaktor belső felületére rögzített anatáz réteggel helyettesítették. A sztrippelési és a napenergiás fotokatalitikus oxidációs folyamatok kinetikáját részletesen leírták az általuk használt vékonyrétegű átfolyásos reaktorokra, valamint kevert tankreaktorokra is.

Felszerelték, és hidegüzemben kipróbálták a festőüzemekben levegőtisztításra használt aktív szén adszorbensek helyszíni regenerálására – GVOP projekt keretében – kifejlesztett technológia mérő és folyamatszabályozó rendszerét.

*Kutatói ráfordítás: 1 fő, ebből intézeti állományban van: 1 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 16 M Ft, ebből pályázati forrás: 3,2 M Ft.*

#### Analitikai módszerfejlesztés és korróziós inhibitor-kompozíció kidolgozása

Vizsgálták talajok, szennyvíziszapok és üledékek feltárásának, illetve kivonatkészítésének hatását a szennyezőként jelenlevő poliaromás szénhidrogének mennyiségi meghatározására, és optimalizálták az egyes komponensek visszanyerésének körülményeit az extrakció során. Szennyvíziszapok, hulladékok feltárásának határfokát elemezték eltérő savkeverékek és feltárási körülmények mellett, különböző vizsgálandó komponensek esetén. Módszereket fejlesztettek ki biológiai eredetű anyagok kromatográfiás vizsgálatára, valamint a polimer láncban nitrogént tartalmazó szerves anyagok nitrogéntartalmának meghatározására.

Inhibitor-kompozíciót dolgoztak ki dízelmotorok hűtőrendszere – mint több galvanikus kapcsolatban levő fémet tartalmazó rendszer – korrózió elleni védelmére. A kifejlesztett kompozíció kísérleti gyártása megkezdődött, üzemi vizsgálatára a Paksi Atomerőműben kerül sor.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 M Ft, ebből pályázati forrás: – M Ft.*

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

Az AKI kutatói 2007-ben is számos hazai kutatóhellyel dolgoztak együtt sokféle kutatási témában. Különösen intenzívek voltak kutatási kapcsolataik az MTA intézeteivel, így a Kémiai Kutatóközpont másik három intézetével és a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi



Kutatóintézettel. A hazai egyetemek közül az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karával, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki Karával, a Semmelweis Egyetemmel, a Szegedi Egyetem Gyógyszertechnológiai Intézetével, a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai, illetve Mérnök Karával, a Debreceni Egyetemmel, a Pécsi Egyetem Általános Orvostudományi Karával és a Miskolci Egyetemmel működtek együtt különböző kutatási témákban.

Az intézet a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtet. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével.

Az intézet munkatársai több egyetemen (Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Miskolci Egyetem, Pannon Egyetem, Közép-Európai Egyetem) tartottak egyetemi és posztgraduális előadásokat, vezettek szemináriumokat és laborgyakorlatokat.

Témáik többségét nemcsak hazai, hanem nemzetközi kutatási együttműködésben is művelték. Formális kétoldalú kutatási együttműködések keretében az alábbi témákban és partnerekkel dolgoztak együtt.

Az intézet munkatársai a pozsonyi Comenius Egyetemmel higiénikus textilanyagok előállításán dolgoztak és újságpapír felületét kezelték nyomdaipari alkalmazás céljából.

A belgrádi Vinca Magfizikai Kutatóintézet kutatóival fullerének RF termikus plazmában történő előállításának tanulmányozása kapcsán a grafit, mint kiindulási anyag egyes szennyezőinek szerepét vizsgálták. A moszkvai Általános és Szervetlen Kémiai Intézettel együttműködve a Si/C/N/O/B/H anyagrendszer esetén a termikus plazmában lezajló kémiai folyamatok termodinamikai modellezését végezték el.

A platinacsoport tagjainak egykristályain elektrokémiai kettősréteg-vizsgálatokat végeztek a német Ulmi Egyetemmel közösen. A Jülichi Kutató Központtal együttműködve elektrokémiai úton állítottak elő és módosítottak nanoréseket.

A felső troposzférára vonatkozó kinetikai és fotokémiai laboratóriumi kísérleteket végeztek az orleans-i Égési és Reaktív Rendszerek Laboratóriumának kutatóival közösen. Ugyancsak fotofizikai témában dolgoztak együtt a göttingeni Max-Planck-Intézettel.

A kínai Dongying városban működő China University of Petroleummal együttműködve biomassza anyagok termikus viselkedését tanulmányozták az új típusú aktív szén előállítási módszereknél lejátszódó folyamatok megismerése céljából.

A Cagliari Egyetemmel a napenergiás sótalanításra irányuló kutatásokban működtek együtt.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

##### *Hazai pályázatok*

Az intézet kutatói által 2007-ben művelt OTKA, illetve OTKA–NKTH pályázatok közül az alábbiakban értek el figyelemre méltó eredményeket:

- Poetilén-tereftalátot kezeltek nitrogén plazmaimmerziós ionimplantációval és feltárták a módosított réteg felületkémiai és kopásállósági tulajdonságainak változásait (K 066741).

- XPS módszerrel minőségi, mennyiségi és kötészerkezeti, míg XPS MultiQuant módszerrel morfológiai modellvizsgálatot végeztek politejsav-poliglükolsav alapú nanostrukturált rendszereken (K 068120).
- Kidolgozták tervezett tulajdonságú ferritek előállításának módszerét, és meghatározták a grafit szennyezőinek hatását fullerének termikus plazmában történő előállításakor (T 047360).
- Kidolgozták többféle különleges nanoszerkezetű polimer kotérháló szintézisét, és felderítették a kapott anyagok szerkezetét, valamint egyéb fontos tulajdonságait (T 046759).
- Összefüggést állapítottak meg csillag polimerek szerkezete és a kiindulási lineáris polimer karok molekulatömege között, és új módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására (T 048409).
- Különböző polimer kotérhálók előállításával és nanoszerkezetű morfológiájuk nagyműszeres analizisével foglalkoztak (IN64295).
- Kidolgozták szabályosan váltakozó szerkezetű amfilil polimer kotérhálók és többfunkciós inimerok szintézisét (F 061299).
- A polimer mátrix jellemzőinek, elsősorban merevségének a töltőanyag tartalmú polimerek szerkezetére, mikromechanikai deformációs jellemzőire gyakorolt hatását vizsgálták (F 068579).
- Rétegszilikát tartalmú nanokompozitok előállítására alkalmas új típusú töltőanyagokat jellemeztek (K 067936).
- Kísérleteket végeztek talaj- vagy szennyvizek perklorát-, nitrát- és halogénezett szénhidrogén tartalmának eltávolítására, valamint kismennyiségű platina meghatározására (K 067874).
- Kísérleti és elméleti kutatásokat végeztek fotofizikai folyamatok oldószerfüggésének általánosabb leírására (T045890).
- Megállapították, hogy a légkörkémiában fontos etil-metil-keeton fotobomlási kvantumhatásfoka nyomásfüggő, és leírható a lineáris Stern-Volmer összefüggéssel (K 068486).
- Termoanalitikai vizsgálatokkal összefüggéseket állapítottak meg a növényi eredetű minták szervesanyag-összetétele, a szervesetlen sók és az extrahálható anyagok mennyisége, valamint a hőbomlás sebessége és a bomlástermékek eloszlása között (K 061504).
- Feltárták foszfortartalmú szervesetlen és szerves égésgátló adalékoknak vinil-polimerek és -kopolimerek hőbomlási reakcióira gyakorolt hatását (K 068752).

Az intézet kutatói egyéb hazai kutatási pályázatokban a következő eredményeket érték el 2007-ben:

- Többféle, a fehérjék szabályozott hatóanyag leadását biztosító gyógyszerkészítményt állítottak elő (GVOP-3.1.1.-2004-05-0031/3.0).
- Nanoméretű, oxid- és nemoxid kerámiaporokat állítottak elő RF termikus plazmában, és vizsgálták azok alkalmazását különböző területeken (OMFB-00252/2007).
- Vizsgálták fémgözkök viselkedését az eddig ismert plazmatechnológiai eljárásokban, fémgőz-ívű plazmafáklya kifejlesztése érdekében (JÁP\_TSZ\_P0400808).
- Megállapították, hogy a tumoros állapot előrehaladásának mértéke megállapítható a szervezetben szignifikánsan megváltozó redox-paraméterek és fémkoncentrációk alapján (NKFP 1A005/2004).
- Előre meghatározott tulajdonságú poli(etilén-imin)-t állítottak elő (DermaVi\_HIKC05 Asbóth program).

- Felszerelték, és hidegüzemben kipróbálták az általuk kifejlesztett aktív szén adszorbensek regenerálására használható mérő és folyamatszabályozó rendszert (GVOP-3.1.1./2004-05-0153/3.0).

#### *Nemzetközi pályázatok*

Az intézet kutatói 2007-ben, a nemzetközi együttműködésben művelt EU pályázatokban az alábbi eredményeket érték el:

- Módszereket dolgoztak ki enzimek rögzítésére alkalmas makro-, mikro- és nanoszemcsés kitozán hordozó részecskék előállítására (MRTN-CT-2004-512247)
- Oxigéntartalmú szerves molekulák és szabadgyökök légköri lebomlására adtak meg kinetikai és fotokémiai paramétereket (GOCE-CT-2004-505390-SCOUTO3).

Egyéb nemzetközi vagy külföldi forrásból művelt témák:

- Sokkomponensű nanoszemcsés katalizátorokat állítottak elő RF termikus plazmában. Együttműködő partner: BASF (Németország). RF plazmában mágneses nanorészecskéket tartalmazó szénhagymák előállítását vizsgálták a Varsói Egyetem Kémia Tanszékével együttműködve.
- PP és PA nanokompozitok szerkezet/tulajdonság összefüggéseinek megállapításában eredményesen működtek együtt a holland Twente Egyetemen, Szlovák Tudományos Akadémia Polimer Intézetével és a koreai Inha Egyetem kutatóival.
- A Clariant International Ltd. megbízásából különböző antioxidánsok hatékonyságát és hatásmechanizmusát, továbbá a hatékonyságot befolyásoló tényezőket tanulmányozták poliolefinekben.
- DuPont Research Award jóvoltából új típusú multifunkciós polimerek előállítását tanulmányozták.
- Új, amfifil tulajdonságú, nanotemplátként alkalmazható (önszerveződő) poliizobutilén-b-poli(etilénoxid) blokk-kopolimerek előállításában és vizsgálatában a Kolloidok és Határfelületek Max Plank Intézetével (Németország) működtek együtt.
- A francia Lille-i Egyetemen közösen irányítottak PhD munkát az atmoszféra fizikai kémiája témában (ARCUS / PhyCAFoR, 2006/09).
- Különböző biomassza hulladékok és a faszenek hasznosítási lehetőségeinek felderítésében a trondheimi Norvég Tudomány és Technológiai Egyetem és az USA-beli Hawaii Egyetem kutatóival dolgoztak együtt.

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

1. Bertóti I, Mohai M, Tóth A, Ujvári T: Nitrogen-PBII modification of ultra-high molecular weight polyethylene: composition, structure and nanomechanical properties, *Surface & Coatings Technology*, 201, 6839–6842 (2007)
2. Markovic Z, Todorovic-Markovic B, Mohai I, Farkas Z, Kováts E, Szépvolgyi J, Otasevic D, Scheier P, Feil S, Romcevic N: Comparative process analysis of fullerene production by the arc and the radio-frequency discharge methods, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 7, 1–13 (2007)

3. Feczko T, Puxbaum H, Kasper-Giebl A, Handler M, Limbeck A, Gelencsér A, Pio C, Preunkert S, Legrand M: Determination of water and alkaline extractable atmospheric humic-like substances with the TU Vienna HULIS analyzer in samples from six background sites in Europe, *Journal of Geophysical Research*, Vol. 112, D23S10, doi: 10.1029/2006JD008331(2007)
4. Váli L, Stefanovits-Bányai É, Szentmihályi K., Fébel H, Sárdi É, Lugasi A, Kocsis I, Blázovics A: Liver-protecting effects of table beet (*Beta vulgaris* var. *rubra*) during ischemia-reperfusion, *Nutrition* 23, 172–178 (2007)
5. Georgiou TK, Groh W P, Iván B, Patrickios CS: Amphiphilic model conetworks of polyisobutylene methacrylate and 2-(Dimethylamino)ethyl methacrylate prepared by the combination of quasilinging carbocationic and group transfer polymerizations, *Macromolecules*, 40, 2335–2343 (2007)
6. Dányádi, L, Janecska, T, Szabó, Z, Nagy, G, Móczó, J, Pukánszky, B: Wood flour filled PP composites: compatibilization and adhesion, *Compos. Sci. Technol.* 67(13), 2838–2846 (2007)
7. Nádasi R, Kovács Gg, Szilágyi I, Demeter A, Dóbe S, Bérces T, Márta F: Exciplex laser photolysis study of acetone with relevance to tropospheric chemistry, *Chemical Physics Letters*, 440, 31–35 (2007)
8. Pajkossy T, Kolb DM: Double layer capacitance of the platinum group metals in the double layer region, *Electrochemistry Communications*, 9, 1171–1174 (2007)
9. Mészáros G, Li C, Pobelov I, Wandlowski T: Current measurements in a wide dynamic range – applications in electrochemical nanotechnology, *Nanotechnology*, 18, 424004 (8pp) (2007)
10. Demeter A, Mile V, Bérces T: Hydrogen bond formation between 4-(dimethylamino)-pyridine and aliphatic alcohols, *Journal of Physical Chemistry A*, 111, 8942–8949 (2007)
11. Binder W H, Petraru I, Roth T, Groh W P, Pálfi V, Keki S, Iván B: Magnetic and temperature-sensitive release gels from supramolecular polymers, *Advanced Functional Materials*, 17, 1317–1326 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

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

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	83	Ebből kutató <sup>2</sup> :	54
PhD, kandidátus:	18	MTA doktora:	11
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	1
		rendes tag:	2
			25
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			114
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			111
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	54
nemzetközi együttműködés keretében:	30	SCI által regisztrált folyóiratban:	54
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	115,1	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	1244
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1018
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	6
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	20
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	46	posztterek száma:	73
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	12	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			15
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	4	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	28	Gyakorlati kurzusok száma:	11
TDK munkát készítő hallgatók száma:	13	Diplomamunkát:	13
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	12
			1716
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			355 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	5	Teljes saját bevétel:	346,9 MFt
Saját szabadalmi, know-how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			2,3 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			16
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	36,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			5
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	218,7 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,9 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8,5 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			5
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,8 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,3 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			34
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	74,8 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI KUTATÓINTÉZETE

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 15–17.

Telefon: 391–9322, Fax: 275–4668

e-mail: balazs@konkoly.hu, www.konkoly.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A beszámolási időszakban az intézet az alapító okiratban rögzített feladatainak megfelelően alapkutatást végzett, és részt vett a felsőfokú oktatással kapcsolatos feladatok ellátásában.

A fentiekkel összhangban az intézet az alábbi témakörökben folytatott eredményes kutatómunkát:

- *Változócsillagok*
  - A csillagok belső szerkezete és pulzációja
  - Aktív jelenségek csillagok légkörében
- *Napaktivitás*
- *Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája*
- *Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások*

Mint hogy 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

#### *Változócsillagok*

*Csillagok belső szerkezete, pulzációja* (15 kutató, ebből 13 intézeti alkalmazott; becsült intézeti ráfordítás 130 M Ft, ebből pályázati 18 M Ft )

RR Lyrae változók: A V372 Ser feldolgozott megfigyelési anyagából megállapították, hogy 10 éves időskálán belül nem változtak a frekvenciák, amplitudók, sőt a fázisok sem. A többszínfotometriából kapott tömeg összhangban van azzal, amit egy RRd csillagra várnak, a luminozítás a rövid extragalaktikus távolságskálával van összhangban.

Az Alard-féle optimális képlevonási technikát (ISM) kombinálva három különböző változókeresési módszerrel sikerült felfedezni 54 változócsillagot a Palomar~2 gömbhalmazban. Közülük mintegy 30 RR Lyrae típusú, a többi hosszú periódusú vörös változó. Ebben a halmazban eddig egyetlen változócsillagot sem ismertek.

Az intézet 60 cm-es automatizált távcsövével készült fotometriai mérések felhasználásával részletesen tanulmányozták a BS Comae galaktikus mezőbeli kétmódusú RR~Lyrae csillag tulajdonságait. A megfigyelési anyag idősor-analízisével leírták a csillag pulzációs viselkedését, valamint a fenti eljárás alkalmazásával, lineáris pulzációs és fejlődési modelleket felhasználva meghatározták a csillag globális fizikai paramétereit.

Az RR Gem jelenleg kis amplitudójú modulációt mutató Blazhko változó korábban publikálatlan archive fotometriai méréseinek feldolgozásával kimutatták, hogy a csillag

fényváltozása minden megfigyelési időszakban modulációt mutatott. A moduláció amplitúdója azonban jelentős mértékben eltérő volt.

Ellenőrizték és kijavították az RV UMa korábban publikált fotometriai adatait. A javított kiegészített adatsor Fourier-analizise eredményeként először mutattak ki quintuplet szerkezetet egy Blazhko-effektusos csillag spektrumában. Ennek jelentőségét az adja, hogy az effektus elméleti magyarázatai közül a rezonancia modellek a triplet, míg a mágneses ferde rotátor modellek a quintuplet megoldást részesítik előnyben.

A folytatódó megfigyelések tovább erősítették korábbi gyanújukat, miszerint az alaplómódusban pulzáló RR~Lyrae csillagoknak a korábban gondolt 25–30%-nál sokkal nagyobb hányada mutat Blazhko effektust. Az eddig – 2004 óta – itt megfigyelt 15 ilyen típusú változócsillagból 8 egyértelműen modulált. Kiválasztási effektussal ez a magas arány nem magyarázható.

Kifejlesztettek egy olyan eljárást, amely segítségével ritkán mintavételezett vagy/és zajos alaplómódusú RR~Lyrae csillagok fénygörbéinek pontos Fourier analízise válik lehetővé.

$\delta$  Cephei változók: Az RS Puppis körüli reflexiós köd fényességváltozásait elemezve – a jelenséget fényechóként értelmezve – figyelemre méltó pontossággal megállapították az RS Pup hosszú periódusú cefeida távolságát: az  $1992 \pm 28$  parszek érték az eddigi legpontosabb távolság, amelyet valaha is cefeidára meghatároztak. A várhatóan nagy nemzetközi visszhangot kiváltó eredmény alapján jelentősen pontosítható a cefeidák periódus–luminositás összefüggésének kalibrálása.

Az általuk összeállított, több száz klasszikus cefeidát tartalmazó, homogén adatbázis alapján megállapították az adott pulzációs periódushoz tartozó amplitúdók és amplitúdóarányok függését a cefeida légköri nehézelem-tartalmától. Kisebb fémtartalom esetén nagyobb a pulzációs amplitúdó.

Az XZ Ceti általuk észlelt, valamint a BW Comae és DT Geminorum szakirodalomból vett fotometriai megfigyelési adatai alapján arra a megállapításra jutottak, hogy az anomális cefeidák fénygörbéje rövid (néhány napos) időskálán instabil.

A COROT űrtávcső méréseinek az elemzésére numerikus modellsorozatok segítségével feltérképezték a megfigyelések alapján használható, periódus – effektív hőmérséklet síkon a normál és strange cefeidák elhelyezkedését. Mivel viszonylag csak kis átfedés van a két csoport között, ez a két paraméter jó becslést ad az esetleges strange módusok kiválasztására.

$\delta$  Scuti változók: Régi és új észleléseiket kiegészítették az irodalomban talált adatokkal, és az *O-C* diagram analíziséből kimutatták, hogy az AD CMi nagy amplitúdójú delta Scuti csillag kettős rendszer tagja. Az *O-C* diagram fejlődési periódusnövekedéssel és a fényidő effektussal jól leírható volt.

Előzetes feldolgozásra került a HD 5084 és a HD 44195, melyekre a COROT tudományos előkészítő munkája keretében gyűjtöttek fotometriai méréseket. A HD 5084  $\delta$  Scuti csillag több mint 10 frekvenciát mutat az 5-18 ciklus/nap tartományban, beleértve a radiális alaplómódust 6,92 c/d-nál. Megerősítést nyert, hogy a HD 44195 csillag mind a  $\delta$  Scuti, mind a  $\gamma$  Doradus jellemzőket mutatja.

$\lambda$  Bootis változók: Az 1995–1996-os nemzetközi fotometriai kampány alapján vizsgálták a 29 Cygni-t. 11 frekvenciát találtak a 20,3–37,4 ciklus/nap tartományban, melyek mindegyike alacsony *l* horizontális kvantumszámú módus,  $n=2-5$  radiális kvantumszámokkal. A

domináns módust  $f_l=37,425$  c/d frekvenciával  $l=2$ ,  $n=5$  kvantumszámokkal jellemezhető módusként azonosították.

Fehér törpék oszcillációja: A PG 0122+200 csillagnál, amely definiálja a PG 1159 instabilitási sáv vörös szélét, 23 frekvenciát határoztak meg a nemzetközi kampány adatai alapján. Ezek között 7 tripletet és 2 egyedülálló frekvenciát találtak. A triplettek interpretálása, az  $l=1$  módusok rotációs felhasadása, vezetett az 1,55 napos rotációs periódus meghatározásához. A periódusok elrendeződésében talált 22,5 másodperces szisztematikus különbség a csillag tömegének a korábbinál pontosabb meghatározására vezetett.

2005 szeptemberében részt vettek a PG 2303+243 jelű DAV csillag észlelésében. A kapott eredmények alapján a csillagnál nagy számú (69) pulzációs frekvencia azonosítható a  $\approx 0,5$ -6 mHz-es tartományban, melyek közül a legtöbb amplitúdója változik. A legstabilabb, 1.622 mHz körül talált pulzációs frekvencia segítségével becslést lehetett adni a csillag inklinációjára, melyre kisebb, mint  $12^\circ$  adódott.

Pulzáló változók modellezése: A CASSINI (Cepheid Atmospheres and Structures by Spectroscopy Interferometry and Numerical Investigation) project célkitűzéseinek megfelelően vizsgálták, hogy a különböző hidrodinamikai kódokkal kapott modellek mennyire adnak eltérő eredményt egyedi csillagok fizikai paramétereire. A többek által használt radiatív modellekkel kapott hőmérséklet 200–300K-el, a luminozitás pedig akár 50%-kal eltérhet a Florida-Budapest kód turbulens-konvektív eredményeitől.

A modell összehasonlításokhoz kapcsolódva vizsgálták a hidrodinamikai modellek numerikus konvergenciáját a térbeli felbontás, azaz a zónák száma szerint. A konvergencia tesztnek egy érdekes mellékterméke, hogy a hosszú periódusú (nagy luminozitású) cefeidák esetén a modellek csak több mint 100000 ciklusnyi tranzienst után érik el a végső határciklust.

Modellezték a MOST műholddal kapott AQ Leonis frekvenciáit. Az alapon kétmódusú RR Lyrae csillagban egy harmadik periódust is kimutattak. A harmadik módus a modellek alapján lehet a 3. felhang, azonban nem sikerült tökéletesen illeszkedő periódusú modellt találni.

Megmutatták, hogy a cefeidák fáziskésése (a fénygörbéjük és a radiális sebesség-görbéjük közötti fáziseltolódás) felhasználható a radiális módusok azonosítására. Kimutatták, hogy az eddig első felhangban rezgőként klasszifikált V440~Persei kisamplitúdójú cefeida fáziskésése jobban összeegyeztethető a modellekkel, ha alapmódusbeli pulzációt tételeznek fel.

Kétmódusú RR~Lyrae csillagok esetén vizsgálták a lineáris és nemlineáris periódusok, valamint periódusarányok közötti eltéréseket. Az átfogó vizsgálat kiterjedt a csillagok fizikai paramétereinek (tömeg, effektív hőmérséklet, luminozitás, fémtartalom), valamint numerikus paraméterek (zónaszám, alsó határfeltétel) okozta hatások vizsgálatára is. A sok modellszámításhoz és a hosszú idejű integráláshoz elengedhetetlen volt az NIIF szuperszámítógépének használata.

*Aktív jelenségek csillagok légkörében* (4 kutató, ebből 3 intézeti; becsült intézeti ráfordítás 30 M Ft, ebből pályázati 4 M Ft)

Egy V-színben 21,3 magnitúdós dM4 csillag B, V fotometriai észleléseit feldolgozva több fler eseményt sikerült detektálni, amelyek közül a legnagyobb időtartama  $t_{eq}=19,5$ h, bolometrikus energiája pedig a valaha észlelt legnagyobb flerekre jellemző  $10^{36}$ erg nagyságrendű. A fénygörbe poszt-fler viselkedésére a Nap-analógia segítségével alkottak modellt.



Továbbfejlesztették a Doppler-leképezéshez használt programkörnyezetet, hogy a szoros kettőscsillagokban előforduló – a szféríkustól eltérő torzult (Roche-) geometriát is kezelni tudják. Ennek segítségével modellezték a zeta Andromedae RS CVn-típusú mágneses aktivitást mutató kettőscsillagot. Li spektrum alapján a csillag közel áll a lítiumban gazdag RGB csillagok csupán néhány tagot számláló csoportjához, ami a fejlődési állapottal van összefüggésben.

Idősoros Doppler-képek alapján egy (a Nap képekre kidolgozott) kétdimenziós kereszt-korrelációs algoritmussal különböző csillagok ( $\sigma$  Gem, UZ Lib, LQ Hya) felszíni áramlásait kutatták. Az új módszerrel kapott eredmények jó egyezést mutattak a korábban kapottakkal. A  $\sigma$  Gem RS CVn-típusú óriáscsillag idősoros Doppler-képeinek segítségével anti-szoláris differenciális rotációt találtak.

Az LQ Hya H $\alpha$  spektrumait felhasználva részletes vizsgálatot folytattak, mely célja a kromoszféra feltérképezése volt. Sikert ért el a kapcsolat megtalálása a fotoszférikus foltok és a kromoszférikus fáklyamezők között, ezzel erősítve a Nap-aktív csillag analógiát.

Analizálták 12 aktív csillag hosszú időskálájú fotometriai adatait (UZ Lib, HU Vir, IL Hya, IM Peg, UX Ari, XX Tri, EI Eri, AB Dor, V410 Tau, FK Com, V711 Tau, LQ Hya). Számos esetben találtak időben változó ciklushosszakkal, melyeknek az eredete ismeretlen, hiszen elméletileg még a 11 éves napciklust is nagyon nehezen állítják elő. A változó ciklushosszak mind fotometriai, mind pedig spektroszkópiai (Ca index) adatok esetében jelentkeztek.

Az SV Cam aktív kettőscsillagról készült fotoelektromos méréseik elemzése nem igazolja azt a szakirodalomban elterjedt nézetet, hogy a főkomponensen poláris foltok találhatóak.

A TT Ari kataklizmikus változó a közelmúltban – megfigyeléseik szerint – drasztikus változásokon ment keresztül. A korábbi pozitív szuperhump állapot bizonyosan megszűnt, viszont nem jött létre a várt negatív szuperhump állapot (legalábbis nem teljesen). A még megerősítésre szoruló feltételezések szerint a másodkomponens fényességváltozásait a csillag mágneses aktivitásának 27,5, illetve esetleg 6,25 éves változásai okozhatják.

*Napaktivitás* (6 kutató, ebből 6 intézeti; becsült intézeti ráfordítás 60 M Ft, ebből pályázati 8 M Ft)

Kidolgoztak egy új modellt a korona kitöréseknek (CME) a napkoronában való fejlődésére. A mágneses átkötődések sorozata energia felszabadulással jár (kis flerek jelennek meg nyomában), ami a koronában egy táguló fényes gyűrűként jelenik meg. Ilyen gyűrűket valóban látunk a koronában, 1999-ben a SOHO/EIT műszer képein fedezték fel őket. Az általuk javasolt új modell ezekre a jelenségekre természetes magyarázatot szolgáltat. A fenti modellt sikeresen alkalmazták egy csillagfler leszálló ágában megjelenő kisebb flerek magyarázatára.

Az űr-időjárás szempontjából igen fontos a CME-k által okozott geomágneses aktivitás előrejelzése (amely a déli irányú mágneses vektor erősségével és időtartamával van kapcsolatban). A CME forrásvidékének mágneses orientációját felhasználó előrejelzések nem mindig járnak sikerrel. Kimutatták, hogy ennek oka az aktív vidékben felhalmozódott helicitás, amely a kitörés korai szakaszában a táguló fluxus hurok jelentős megcsavarodásához, elfordulásához vezethet.

A Hinode EIS spektrométerének észleléseit felhasználva bizonyították azt, hogy a korona lyukakban megfigyelt forró jet-ek anyaga részben visszahullik a Napra.

Tovább folytatták a napfoltcsoportok meridionális/azimutális elmozdulása közötti korreláció vizsgálatát. A korreláció-értékek a heliografikus szélességgel monoton csökkennek, az egyenlítőnél előjelet váltanak. A 22. ciklus maximuma körül korábban is találtak váratlan viselkedést, ezt annyiban pontosították, hogy a korrelációértékek szélességfüggését leíró függvény igen jól követi a ciklus foltterület-adatokkal felrajzolt profilját.

Vizsgálták a napfoltok tulajdonságainak szélességbeli eloszlását és a torziós oszcilláció kapcsolatát a Debrecen Photoheliographic Data alapján. Eredményeik szerint a foltok az előre tartó sávok pólusok felőli részeit preferálják. A többi tulajdonság nem mutat összefüggést a torziós sávokkal.

A heliografikus koordináták meghatározásához szükséges ismerni a CCD camera irányítását a naphoz viszonyítva. Kidolgoztak egy eljárást, amellyel ezt nagy pontossággal meg lehet határozni.

Folyamatosan bővítették a Debrecen Photoheliographic Data (DPD) adatbázist. Az 1998-ra vonatkozó végleges adatokat és képeket ftp-re tették. Folytatták az archívum kiegészítését egész-korong fehér fényű mágneses észlelésekkel.

Folytatták a SOHO/MDI-Debrecen Data katalógus (SDD) készítését. A kvázi-kontinuum egész-korong képeken elvégezték a foltok meghatározását az 1998–2007-es időszakra, és online publikálták a katalógusokat a kvázi-kontinuum és mágneses képekkel együtt.

*Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája* (6 kutató, ebből 6 intézeti; becsült intézeti ráfordítás 60 M Ft, ebből pályázati 15 M Ft)

Meghatározták a Lynds 1622-ben keletkezett kis tömegű fiatal csillagok spektráltípusát, luminozitását, tömegét és korát. Nagoyai szénmonoxid-adatokból elkészítették a felhő eddigi legjobb szögfelbontású szénmonoxid-térképét, és meghatározták a felhő tömegét.

Az arizonai Whipple Observatory 1,5~m-es, valamint a Calar Alto Observatory 2,2~m-es teleszkópjaival spektrumokat vettek fel a Lynds~1622 H $\alpha$  emissziós csillagairól. A piszkés-tetői RCC távcsővel megmérték a VRI magnitúdóikat. A kapott HRD, fősorozat előtti fejlődési modellekkel összehasonlítva egyértelműen azt mutatja, hogy a L1622 sokkal közelebb van, mint az Orion-felhők (450 pc), tehát valószínűleg része a 160 pc távolságban azonosított extinkciós rétegnek.

Calar Alto-i és arizonai spektrumok, valamint piszkés-tetői BVRI magnitúdók alapján meghatározták a Cepheus flare területén közel 100 fősorozat előtti csillag effektív hőmérsékletét, luminozitását, tömegét és korát. A terület egyes felhőire külön meghatározták a csillagkeletkezés időtartamát.

Feldolgozták a kettős T Tauri csillagok eddig publikálatlan ISOPHOT méréseit. Elkészítették 16 fiatal kettős optikai, infravörös és szubmilliméteres spektrális energiaeloszlását (SED), és megvizsgálták, hogy a kettősök szeparációja egyértelműen meghatározza-e a csillagkörüli anyag geometriai eloszlását, és így a SED alakját. Eredményeik szerint a rendszer evolúciója is fontos szerepet játszik. Az egyik kiválasztott csillag, a V4046 Sgr spektrális energiaeloszlását részletesen is modellezték egy modern sugárzási transzfer kód segítségével.

Összeállították az OO Serpentis csillag spektrális energiaeloszlását (SED-jét) több különböző időpontra, és 10 különböző infravörös hullámhosszon elkészítették a csillag fénygörbéjét. Az adatokból megállapították, hogy (1) a kitörés az egész infravörös

tartományban megnövelte az objektum fényességét; (2) a maximális fényességet egyre lassuló, hullámhossz-független halványodás követte; (3) a halványodás jelenleg is tart, és a mostani halványodási rátákból extrapolálva az OO Ser valószínűleg nem fog visszatérni a kitörés előtti állapotba 2011 előtt; (4) a kitörés időskálája rövidebb a FUorokénál, de hosszabb az EXorokénál, leginkább a nemrég kitört V1647 Ori-ra hasonlít.

A Parsamian 21 csillagról 2004-ben készültek direkt és polarimetriás mérések a VLT-n a NACO adaptív optikás műszerrel. Ezeket az adatokat kiegészítették más, az irodalomban elérhető, infravörös és optikai adatokkal (Hubble/WFPC2 képek, Hubble/NICMOS polarimetria, Spitzer/IRAC és MIPS képek, Spitzer/IRS spektrum, ISO fotometria). Vizsgálatukban (1) érveket hoztak fel az objektum FUor-természete mellett; (2) megállapították, hogy a csillag nem része fiatal csillagok halmazának (FUoroknál szokatlan módon); (3) a polarimetriás képeken jól megfigyelhető egy csillagkörüli burok, abban egy nyílás a pólusok irányában.

A Spitzer infravörös műhold segítségével elvégezték 78 F színképtípusú csillag fotometriai (24, 70 és 160 $\mu$ m-en) és spektroszkópiái (6–35 $\mu$ m) vizsgálatát. A mérések alapján 29 csillag esetében sikerült kimutatniuk – egy, vagy több hullámhosszon – infravörös többletet. A csillagok javarésznél a talált por hőmérséklete kisebb mint 80 K.

*Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások* (13 kutató, ebből intézeti 6; becsült intézeti ráfordítás 60 M Ft, ebből pályázati 15 M Ft)

A Naprendszer kis égitestei: az ún. Statisztikus Kisbolygómodellre (Statistical Asteroid Model) alapozva kidolgoztak egy olyan modellt, amely a kisbolygók pályaelemeit integrálva 2000 és 2013 közötti időpontokra képes megadni kb. 2 millió kisbolygó helyzetét és fényességét az 5–1000 $\mu$ m-es hullámhossz-tartományban. Ebből meghatározható a kisbolygókból származó zavaró hatás egy adott infravörös vagy szubmilliméteres mérésre.

A Hubble űrteleszkóp Bolygókamerájával (PC2) 2007. október végén – november elején több alkalommal is megfigyelték a 2007. október 23-24-én váratlanul szuperkitörésen átesett, a Jupiter-családhoz tartozó 17P/Holmes üstökösöt. A HST kitűnő optikája lehetővé tette a Holmes-üstökös magja kitörés utáni méretének meghatározását: ez 3,4 km effektív átmérő.

A Spitzer űrtávcső SST MIPS (Multi-band Imaging Photometer for Spitzer) műszerével 2006/2007-ben több mint száz, a Jupiter-családhoz tartozó üstökösöt figyeltek meg. Majdnem mindegyik target objektumot elegendően nagy, 4 CsE-nél nagyobb naptávolságban figyeltek meg azért, hogy az üstökös porkibocsátási aktivitásából származó zavaró porkóma minimális hatással legyen az üstökös mag fényére. Meghatározták a magok méretét és albedóját.

A 67P/Churyumov-Gerasimenko (67P/C-G), a Rosetta ESA űrszonda cél-üstököséről a Spitzer űrteleszkóp MIPS műszerével a 24 mikronon végzett termális infravörös megfigyelésekre új kalibráció készült, amelynek felhasználásával tovább finomították a 67P/C-G magjának fizikai paramétereit. A mag alakját egy ellipszoiddal modellezve a tengelyek teljes hossza 4,40–5,20~km, 4,16–4,30~km, valamint 3,40–3,50~km.

Látható fényben végzett földi bázisú, illetve a Rosetta OSIRIS kamerája által nagy távolságról készített 26 fénygörbe felhasználásával meghatározták a 2867 Stein kisbolygó méretét, közelítő alakját, tengelykörüli forgási idejét, valamint a forgástengelyének térbeli irányát. A kisbolygó alakját közelítő elnyújtott ellipszoid modell test méreteit a Spitzer űrtávcső termális infravörösben végzett megfigyelései segítségével határozták meg.

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

Planetáris kutatások: A Cassini szondának a felvételein a Szaturnusz déli poláris vidékén a földi trópusi viharokhoz hasonló óriási ciklon látható. Feltételezésük szerint a poláris örvények a bolygóval együtt, de nem merev testként forgó légkörök poláris szélnyírásának következtében létrejövő képződmények.

A Mars déli sarkvidékén felfedezett, téli-tavaszi *sötét dűnefoltok (DDS)* további vizsgálatára a Mars Express és Mars Global Surveyor szonda (MGS) adatait összekapcsolták a Mars Reconnaissance Orbiter-szonda (MRO) új adataival. DDS-ek fejlődése során két fázist sikerült elkülöníteni. Az első fázisban a széndioxid jégtakaró alól kitörő anyag hozhatja létre az alakzatokat, az amerikai gejzír modellnek megfelelően – míg a második fázisban csak, vagy elsősorban vízjég lehet a felszínen. Eszerint az utóbbi fázishoz kapcsolódó folyásos jellegű képződmények vízjéggel, esetleg vízzel kapcsolatosak.

Exobolygók kutatása: Az elmúlt év leglényegesebb eredménye a 6+1 extraszoláris bolygó felfedezése (6 objektum a HAT projekt keretében, egy pedig a TrES-el együttműködve). A nagylátómezejű (fényes objektumokat feltérképező) projektekre vetített, 2007 decemberig felfedezett bolygók számát tekintve a HAT projekt a legsikeresebb.

A 236-számú WHAT mezőn általános periódikus változókra vonatkozó keresést végeztek és összesen 13360 objektumot analizáltak  $V=15$  magnitúdóig. Ebből a mintából 152 objektumnál találtak szignifikáns periódikus jelet. Fontos megjegyezni, hogy a 152 változóból 133 új felfedezés. A változók periódusa 0,09 és 31 nap között van. Találtak nem periódikus változókat is. Ezek száma 14, melyből 10 új felfedezés.

A HRD extrém horizontális ágán héliumot égető, pulzáló SdB csillag, a V 391 Peg nemzetközi összefogás keretében történt megfigyelése alapján részesei lehetnek a V 391 Peg b exobolygó felfedezésének. A felfedezés új területet nyit az exobolygó kutatásban. Az a számítás, mely szerint a V 392 Peg 0,7 CSE sugarú volt a vörös óriás fázisban és a bolygó a csillag fősorozati fázisában 1 CSE távolságban keringett, azt bizonyítja, hogy a 2 Nap-Föld távolságnál közelebb lévő bolygók is túl tudják élni a központi csillaguk vörös óriás fázisát.

Fedési kettőscsillagok: Kettőscsillagok fejlődési útvonalait számító kód fejlesztésének első fázisa lezárult. A kóddal megvizsgálták, hogy milyen kettőscsillagokból alakulhat ki W UMa-típusú érintkező kettőscsillag. Az első eredmények szerint bármilyen színképosztályú komponensekből álló kettőscsillagból kialakulhat érintkező kettőscsillag a fősorozaton. Rámutattak arra az ellentmondásra, hogy bár kialakulhatnak, nem léteznek 10 000–16 000 K közötti átlaghőmérsékletű érintkező kettőscsillagok.

Gamma kitörések: A Swift mesterséges hold a detektált gamma kitörések nagyobbik részénél nem észlelt optikai utófényt. Ezekben az esetekben az optikai fényességre csak felső korlátot lehet megadni. Tanulmányozták az optikai fényesség függését a kitörés gamma-tartományban észlelt tulajdonságaitól. Azt találták, hogy az optikai fényesség 99,7% szignifikancia szinten függ a gamma-tartományban mért csúcsintenzitástól.

A többváltozós statisztika diszkrimináció analízisének használatával összehasonították az optikailag fényes és optikailag sötét kitöréseket. A SWIFT műhold megfigyeléseiből felhasznált 7 változóból kettő mutatott szignifikáns eltérést. Az optikai tranzienszt produkáló kitörések nagyobb „peakflux”-al rendelkeztek, és a hidrogén oszlopsűrűség átlagban alacsonyabb volt.

Elkészítették a Palomar hegyi P60 automata teleszkóppal 2005-2006-ban végzett GRB OT optikai megfigyelések fotometriai kiértékelését.

Herschel űrprojekt: A PECS program keretében több tesztmérés kiértékelésében is részt vettek: 1) a Herschel PACS ún. „frequency switching” mérési módjának tesztelése; 2) szaturációs szintek meghatározása a PACS spektrométerének kék és vörös detektoránál; 3) „noise-equivalent power” meghatározása a PACS spektrométerének kék és vörös detektoránál.

Csillagászat története: Eddig jóformán semmi adat nem volt Kövesligethy Radó 1866 és 1873 között eltöltött időszakáról és anyjának Renz Josephinnek családjáról és születési körülményeiről. Egy altenstadti levéltáros, Dieter Imminger segítségével, szinte mindent sikerült megtudniuk Kövesligethy Radó elemi iskolás esztendeiről. Kövesligethy Radó spektroszkópiai munkásságát tanulmányozták, különös tekintettel nemzetközi elfogadottságára. Megmutatták, hogy a korabeli német fizikusoknak ismerni kellett eredményeit.

Arhaeoastronomia: Bastanya nagy rézkori temetőjének feldolgozása befejeződött. Régészetiileg meghatározott két korszakának különbségét (etnikai, életformabeli) a sírok Nap szerinti tájolásának erőteljes megváltozása is világosan mutatja.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

*Hazai:* Együttműködtek a soproni GGKI-vel (felsőléggkörü kutatások, planetológia); az ELTE Gyógyypedagógiai Főiskolai Karával (hallásvizsgálat) a Budapesti Műszaki Főiskolával (egyedi előadás a fényszennyezésről); valamint a SZTAKI Analogikai és Neurális Számítások Laboratóriumával (új hullámfront érzékelő fejlesztése).

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: Szeminárium a csillagközi anyag és a csillagkeletkezés témaköréből, Asztrofizika, Csillagászat és kultúra, Csillagpulzáció, Csillagok világa, A csillagkeletkezés alapjai, Obszervációs csillagászat, Csillagászat a fizika tanár továbbképzőn, Csillagaktivitás – aktív csillagok I–II., Asztrofizikai mérési módszerek, Asztrostatisztika I–II, Csillagrendszerek dinamikája. Gyakorlat: Mérési gyakorlat IV. éves fizikus hallgatók számára.

DE-n: Előadás: Bevezetés a csillagászatba, A Nap és a csillagok fizikája.

SZTE-n: Előadás: A csillagközi anyag és csillagkeletkezés, Űrcsillagászat.

*Nemzetközi:*

- Együttműködés az International Astronomical Union-nal (IBVS szerkesztés, IAU Comm. 27., Comm. 42 és Div. V. WWW szolgáltatások karbantartása).
- Részvétel nemzetközi szakbizottságokban (ASTRONET, SCOSTEP, SEAC).
- TÉT együttműködés az IAC-vel (Tenerife, Spanyolország) Naphoz hasonló csillagok keletkezésének vizsgálatára.
- Együttműködés az amerikai Spitzer infravörös mesterséges holdra és az európai VLT teleszkópra benyújtandó pályázatok közös kidolgozásáról (MTA Csill. Kut., MPIA Heidelberg, STSI Baltimore, Stewart Obsz. Arizona).

- Részvétel az ESA Herschel űrtávcső előkészítő munkálataiban, hivatalos tagság a PACS műszer Instrument Control Centre-ben (ESA/PECS által támogatott projekt).
- Részvétel a COROT mesterséges hold előkészítő munkálataiban és az Additional Program-ban (ESA/PECS által támogatott projekt).
- GAIA asztrometriai űrmisszió változócsillag-munkacsoport; folyamatos részvétel a Nemzetközi Asztronautikai Akadémia munkájában.
- Együtműködés a Princeton University Observatory-val, automatizált változócsillagászati megfigyelésekben.
- Szoros együttműködés a Harvard Smithsonian Center for Astrophysics intézettel (HATNet adatanalízis).
- Közös projekt a Wise Observatory-val, Izrael (Wise Hungarian-made Autom. Telescope).
- 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).
- Együtműködés a stanfordi SOHO/MDI kutatócsoporttal közös katalógus készítése céljából (ESA/PECS által támogatott projekt).
- Részvétel az ESO VLTI új generációs közép-infravörös interferométerének fejlesztésében (EU 6 FP OPTICON/JRA4 által támogatott projekt).
- Munkakapcsolat az AIP Potsdam-mal.
- Francia-magyar együttműködés a Naprendszer kutatására az MTA-CNRS egyezmény keretében.
- Japán-magyar együttműködés a csillagközi anyag kutatására (Nagoya Egyetem).
- Kezdeményező szerep és szervezőmunka a támogatásra elfogadott SOTERIA 11 európai ország 16 kutatóintézete) projekt előkészítésében.
- Együtműködés a Bolgár Akadémiával, a Virtual Observatory fejlesztésével kapcsolatban
- Részvétel az Euro-VO Data Centre Alliance-ban.
- A 24“-es távcsőhöz kiegészítő méréseket kapnak (Michigan State Univ., AAVSO, ESO)
- Munkakapcsolat a Penn State Univ-vel gamma kitörések vizsgálatára.
- Kapcsolat a NASA PDS-SBN-nel.
- Együtműködés a Max-Planck-Institut für extraterrestrische Physik (Garching) intézettel egy aszteroida konfúziós zaj becslő rutin kifejlesztése céljából.
- Részvétel a Herschel ESA űrtávcső „TNOs are cool: A Survey of the Transneptunian Region” című Open Time Key Program-ja köré szerveződött konzorciumban.
- Konzorcium szervezése és vezetése a Herschel űrtávcső „The structure and evolution of cold protoplanetary disks: A high-resolution PACS survey of the Gould Belt at 70 micrometer” című Open Time Key Program pályázat beadására.
- Részvétel a CASSINI (Cepheid Atmospheres and Structures by Spectroscopy Interferometry and Numerical Investigation) projektben.
- Részvétel az European Association for Solar Telescopes konzorcium munkájában.
- Rendszeres megfigyelések a Teide Obszervatóriumban az EU FP6 Opticon programja támogatásával.
- A Csillagászat 2009 (a csillagászat nemzetközi éve) magyarországi node-ja.
- Szoros együttműködés és megfigyelések a Whole Earth Telescope network számára.

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az ESA-val történt szerződés alapján három PECS pályázat fut az intézetben. Ezek közül kettő (COROT, Herschel) újonnan létrehozandó űreszközök előkészítésében, illetve programjának a lebonyolításában teszi lehetővé részvételüket. A harmadik pályázat keretében egy ESA adatbázis (SOHO/MIDI), illetve földi bázisú megfigyelések egybevetése a feladat. Mindhárom pályázat fontos kapcsolódást jelent élvonalbeli európai projektekhez.

Az EU 6-os keretprogramjában az OPTICON project keretében vesznek részt. Ennek során részt vesznek az ESO négy 8-mes távcsövéből álló interferometriai rendszer kialakításában a MATISSE második generációs optikai interferometer fejlesztésében.

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

1. Acosta-Pulido, JA, Kun M, Ábrahám P, Kóspál Á, Csizmadia Sz, Kiss LL, Moór A, Szabados L, Benkő JM, Delgado, RB, Charcos-Llorens, M, Eredics M, Kiss ZT, Machado, A, Rácz M, Almeida, CR, Székely P, Vidal-Núñez, MJ: The 2004–2006 outburst and environment of V1647 Ori, *Astron. J.* 133, 2020–2036 (2007)
2. Kóspál Á, Ábrahám P, Prusti T, Acosta-Pulido, J, Hony, S, Moór A, Siebenmorgen, R: The outburst of the eruptive young star OO Serpentis between 1995 and 2006, *Astron. & Astroph.* 470, 211–219 (2007)
3. Kovács G, Bakos GÁ, Torres, G, Sozzetti, A, Latham, DW, Noyes, RW, Butler, RP, Marcy, GW et al.: HAT-P-4b: A Metal-rich Low-Density Transiting Hot Jupiter, *Astroph. J.* 670, L41 (2007)
4. Kovács G, Kupi, G: Computation of the Fourier parameters of RR Lyrae stars by template fitting, *Astron. & Astroph.* 462, 1007–1016 (2007)
5. Lamy, PL, Tóth I, A'Hearn, MF, Weaver, HA, Jorda, L: Rotational state of the nucleus of Comet 9P/Tempel 1: Results from Hubble Space Telescope observations in 2004, *Icarus* 187, 132–143 (2007)
6. Mkrtichian, DE, Kusakin, AV, Lopez de Coca, P, Krisciunas, K, Akan, C, Malanushenko, VP, Paparó M et al.: Multimode Pulsations of the Lambda Bootis Star 29 Cygni: The 1995 and 1996 Multisite Campaigns, *Astron. J.* 134, 1713 (2007)
7. Kővári Zs, Bartus J, Strassmeier, KG, Vida K, Švanda, M, Oláh K: Anti-solar differential rotation on the active K-giant sigma Geminorum, *Astron. & Astroph.* 474, 165 (2007)
8. Silvotti, R, Schuh, S, Janulis, R, Solheim, J-E, Bernabei, S, ..., Paparó M et al.: A giant planet orbiting the 'extreme horizontal branch' star V391 Pegasi, *Nature* 449, 189 (2007)
9. Sódor Á, Szeidl B, Jurcsik J: The Blazhko behaviour of RR Geminorum II. – Long-term photometric results, *Astron. & Astroph.* 469, 1033–1043 (2007)
10. Szabó R, Buchler, JR, Bartee, J: The Cepheid Phase Lag Revisited, *Astroph. J.* 667, 1150 (2007)
11. Szabados L, Kiss LL, Derekas A: The Anomalous Cepheid XZ Ceti, *Astron. & Astroph.* 461, 613–618 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	63	Ebből kutató <sup>2</sup> :	29
PhD, kandidátus:	12	MTA doktora:	10
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			8
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			191
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			136
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	50
nemzetközi együttműködés keretében:	89	SCI által regisztrált folyóiratban:	74
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	199,223	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	704
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			704
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	51	posztterek száma:	6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	13	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			16
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	5	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	27	Gyakorlati kurzusok száma:	4
TDK munkát készítő hallgatók száma:	6	Diplomamunkát:	10
		PhD-t:	9
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			320
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			276 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	4	Teljes saját bevétel:	56 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			8
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	28 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
Egyéb:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	36 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt



## **KFKI ATOMENERGIA KUTATÓINTÉZET**

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós 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 reaktornyagok vizsgálata, operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése, atomerőművi szimuláció, anyagtudomány, sugárvédelem és környezetfizika, valamint a Budapesti Kutatóreaktor köré csoportosuló kutatások.

Az intézet tevékenységében 2007 folyamán az alaptevékenység gerincét alkotó reaktorbiztonsági kutatások mellett a perspektivikus energiatermelésre (negyedik generációs atomerőművek, kisebb mértékben fűzió) irányuló kutatások szerepe is jelentős volt.

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

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

*Reaktorfizikai kutatások* (11 kutató, 214 M Ft ráfordítás, 38 M Ft pályázat)

A „Generation 4” reaktorok kutatásának jelentős része a hazai, NKTH által támogatott „NAP” és a „HPLWR” EU6 projektek keretében folytatódott tovább. Ezek a projektek kimondottan egy típussal, a szuperkritikus vízzel hűtött reaktorokkal foglalkoznak. 2007-ben létrehozták a zónatervezéshez és az üzemzavar-elemzésekhez szükséges csatolt reaktorfizikai-termohidraulikai számítógépes programok megfelelő változatait (KARATE, csatolt ATHLET-KIKO3D), valamint megtervezték a szuperkritikus hűtésű reaktor aktív zónájának első változatát. A számítások szerint a reaktorfizikai jellemzők, így a reaktor teljesítménye, annak eloszlása a hagyományos nyomottvizes reaktorokénál jóval érzékenyebben függ az átrakási sémáktól, a kiegészítő mérleg alkalmazásától, a visszacsatolásoktól. Az uránkészletek lényegesen jobb kihasználása valamint a nagyaktivitású hulladék minimalizálása reprocesszálást, valamint ennek során a jelenlegi és a gyors neutron spektrummal rendelkező berendezések együttes alkalmazását teszik szükségessé. Megkezdődött egy olyan szcenárió vizsgálata, amiben a jelenlegi reaktorok kiegészített üzemanyagának reprocesszálása során elválasztott transzurán izotópokat, valamint a dúsítás során keletkező szegényített uránt a nagymennyiségben rendelkezésre álló tóriummal együtt gyorsreaktorokban égetik ki. 2007-ben összeállították azt a számítási apparátust, ami alkalmas ezekre a vizsgálatokra.

A NURESIM EU6 projekt keretében a ZR-6 zéró reaktor mérési eredményeivel validálták az „európai platform” APOLLO2 spektrumszámító kódját. Erre a célra aszimptotikus és perturbált fűtőelem-rácsok mért „görbületes tényezőit”, spektrális jellemzőit, aktivitás eloszlásait és hőmérséklet szerinti reaktivitástényezőit használták fel. A számítási és a mérési eredmények eltérései hasonlóan kismértékűek, mint az AEKI-ben kifejlesztett KARATE programrendszer esetén.

Az ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) tokamak tervezése világméretű nemzetközi együttműködés keretében folyik. A Magyar Euratom Fúziós Szövetség tagjaként az AEKI 2007-ben többek között részt vett az ITER egyik diagnosztikai nyílásába tervezett optikai mérőrendszer tervezéséhez szükséges számításokban. A mérőrendszer egyes elemeiben a plazma sugárzása által keltett hő meghatározása az MCNP Monte Carlo program segítségével történt. Ezeket az eredményeket a rendszer hűtésének tervezésekor fogják felhasználni.

Tovább folytatódott az üzemanyag kazettán belüli folyamatok "multi physics" vizsgálata. A vizsgálatok célja a teljesítmény, a hővezetési jellemzők és a hűtőközeg áramlás azimutális helyfüggésének pontos figyelembevétele, és ezáltal a szokásos közelítések DNBR-re gyakorolt hatásának meghatározása. 2007-ben a fűtőelemen belüli teljesítmény és a fűtőelem hővezetése azimutális függésének hatásait vizsgálták egyelőre rögzített termohidraulikai határfeltételek mellett. A számítások szerint a fenti azimutális függések szokásos figyelmen kívül hagyása nem elhanyagolható hibához vezet. Nem kizárható azonban, hogy amennyiben a határfeltételek a további vizsgálatokban részletes (CFD) termohidraulikai számításokból fognak származni, a hatás jóval kisebbnek adódik.

A Budapesti Kutatóreaktor 2006-ban létrehozott és validált csatolt háromdimenziós reaktorfizikai és termohidraulikai modelljével (ATHLET-KIKO3D) elvégezték a reaktivitás típusú üzemzavarok elemzését mind a jelenlegi, mind a közeljövőben tervezett kisdúsítású fűtőelemekből álló zónákra. A számítási eredményeket a kisdúsítású fűtőelem engedélyezési eljárása során fogják felhasználni.

Az utóbbi időben az erőművek egy jelentős részében végrehajtott teljesítménynövelés az adott rögzített kampányhossz mellett kedvezőtlenebb fűtőelem-felhasználáshoz vezet. Ezt általában a dúsítás növelésével kompenzálják, ami viszont gyakran problémához vezet a tároló és szállító eszközök szubkritikusságának tekintetében. Erre a problémára jelenthet megoldást a „kiegési hitel” („burnup credit”) alkalmazása, melynek során a kiegészítő reaktivitás-csökkentő hatása megfelelő megalapozás után figyelembe vehető. A megalapozásnak számot kell adnia a kritikusági számítások bizonytalanságáról, aminek meghatározása viszont jóval bonyolultabb, mint a kiégetlen esetben. Ennek következtében a kiegészítő hitel alkalmazása számos olyan metodikai kérdést vet fel, melyeket világszerte vizsgálnak. 2007-ben egy áttekintő tanulmány készült a fenti kérdésekről, illetve a kiegészítő hitel hazai alkalmazási lehetőségeiről.

A Paksi Atomerőműben alkalmazandó, kiegészítő mérget tartalmazó fűtőelemekből álló zóna számítása céljából továbbfejlesztették a zóna tervezésére és a reaktivitás üzemzavarok elemzésére szolgáló kódrendszert (KARATE, KIKO3D). Jelentős változtatásokat igényelt, hogy az átmeneti kampányok egyaránt tartalmaznak régebbi és újabb, a régieknél hosszabb fűtőelemeket. Kiszámították az átmeneti és az egyensúlyi kampányok reaktorfizikai jellemzőit, meghatározták az üzemzavar elemzések során felhasználandó, azokat burkoló ún. keretparamétereket. Kiszámították a gadóliummos tablettán belüli teljesítmény-eloszlásokat a kiegészítő függvényében, amelyeket a gyors reaktivitás üzemzavarok elemzése során, valamint a fűtőelem-viselkedési kódokban fognak felhasználni. A számítási eredmények a fűtőelem engedélyezését megalapozó biztonsági elemzésekhez szükségesek.

A Paksi Atomerőmű zónatervezési számítására az AEKI-ben kifejlesztett kódrendszert további validációs számításokkal tesztelték. Mindezt az utóbbi időben bevezetett fűtőelem-módosítók, és az ezzel kapcsolatos új átrakási sémák indokolták. Az ellenőrzéshez az

üzemeltetési és az indítási méréseken kívül felhasználták az LR-0 zéró reaktor mérési adatait is.

*Termohidraulikai kutatások* (10 kutató, 110 M Ft ráfordítás, 18 M Ft pályázat)

A *Paksi Atomerőmű Zrt. megrendelésére* több vizsgálatot is végeztek. A fűtőelem kazettában zajló keveredési folyamatok 2006-ban megkezdett kísérleti modellezése 2007-ben a kétdimenziós sebességmezők mérésével folytatódott. A mérésekkel elsősorban a kazetta fejében kialakuló sebességeloszlást kellett meghatározni. A PIV (particle image velocimetry) eljárással az áramlási csatorna négy különböző helyén, változtatott tömegáramok esetén meghatározták az áramlási képet. A kapott eredményeket felhasználva megkezdődött a numerikus számítási modellek validációja.

Termohidraulikai és radiológiai vizsgálatokkal meg kellett határozni a térfogat kiegyenlítő biztonsági és lefúvató szelepeinek üzemi próbái során a környezet sugárterhelését. Ez az adat az erőmű végleges biztonsági jelentésébe (VBJ) kerül bele, és azt a tényt igazolja, hogy ilyen próbák során a környezet sugárterhelése elhanyagolhatóan kicsiny értéken marad. A feladat végrehajtásához ki kellett fejleszteni a térfogat kiegyenlítő szelepeit követő rendszer termohidraulikai modelljét.

A *Paksi Atomerőműben* befejezéséhez közeledik a több éve fejlesztett üzemzavar elhárítási eljárás kiviteli tervezése, aminek segítségével a primer-szekunder átfolyásos üzemzavarok radiológiai következményei minimálisra csökkenthetők. A termohidraulikai vizsgálatok elsődleges célja a sérült gőzfejlesztő szekunder oldali lefúvatásának műszaki megoldása volt a biztonságos üzemzavar kezelés igazolása mellett. A hidroakkumulátorok kezdeti nyomásának hatását vizsgálva a nagy-töréses üzemzavari folyamatra megállapítást nyert, hogy a nominális értéknél 5 barral alacsonyabb nyomásértékig sem a maximális burkolathőmérséklet értéke, sem a zóna újranedvesítésének ideje nem változik. Az üzemzavar-kezelési utasítások felülvizsgálatához részletes elemzések készültek a primer és a szekunder lefúvatás hatékonyságára vonatkozóan. A számítások eredményei szerint kis-töréses esetben, amikor a nagy nyomású befecskendezés nem áll rendelkezésre, a szekunderköri lefúvatást célszerű minél korábban, a primer lefúvatást pedig minél később megkezdeni.

A *GVOP AKF pályázat* (Kondenzációból eredő vízütés vizsgálata csővezetékben) keretében végzendő munkának 2007 az utolsó éve. Az elkészült nagyméretű kísérleti berendezésen a mérésekből kapott adatok alkalmasak voltak az EMK-WAHA kód validálására. A berendezés fel van szerelve olyan érzékelőkkel, amelyek alkalmasak a kondenzáció okozta nyomáscsúcsok milliszekundum időtartamú mérésére. Tudni kellett ezt a jelet mérni, a jeleket fogadni, feldolgozni és tárolni. A mérések és a kódvalidáció teljes körű dokumentálása a projekt befejezéséig, azaz 2008. márciusáig meg fog történni.

Az Országos Atomenergia Hivatal támogatásával több téma kutatása folyt. A hatóságot támogató kódelemzések keretében a korábban elvégzett nagytöréses CATHARE és APROS számítások eredményeit kellett összehasonlítani. A két elemzés kezdeti és peremfeltételeiben kimutatott különbségek felszámolása után a számítások jó egyezést mutattak. Vizsgálat tárgyát képezte a CATHARE kóddal a reaktorcsarnokban bekövetkező, maximális méretű gőzvezeték-törés folyamata. A csarnokba kiáramló hűtőközeg jellemzői a csarnok igénybevételének számításához szükségesek. Az OECD BEMUSE projektje keretében a maximális primerköri hűtőközegvesztéses folyamat vizsgálatára egy amerikai referencia-erőműre készülnek elemzések. Az AEKI által az ATHLET kóddal a legjobb becslés módszere szerint végzett számítás szerint – a projekt keretében specifikált hideg állapotú fűtőelem-

geometriát véve figyelembe – a maximális burkolathőmérsékletek alig több mint 100 K-nel maradnak el a biztonsági határértéktől, s így féltő, hogy a bizonytalansággal terhelt számítás eredményei meghaladják azt. Ez utóbbi számítások elvégzése a 2008. év feladata lesz.

A Paksi Atomerőműben a közeljövőben át fognak térni az un. gadolíniumos fűtőelem kazetták alkalmazására. Emiatt kiemelt fontosságú kérdéssé vált a kazetta kilépő hőmérsékletét mérő eszköz jelének pontos értelmezése a kazettán belüli teljesítmény egyenlőtlenség függvényében. Ez csak a hűtőközeg áramlásának mikro szerkezetét figyelembe vevő CFD típusú számításokkal tehető meg, de ehhez a felhasználandó kódot kísérleti adatokkal validálni kell. Az 1:1 méretarányú modell elkészítésével és az áramlási képet zavarás nélkül feltérképező PIV (particle image velocimetry) mérési módszer alkalmazásával elvégzett kísérletekkel megkezdődött a FLUENT kód kísérleti validációs adatbázisának felépítése.

#### *Fűtőelem és reaktoranyag kutatások (19 kutató, 260 M Ft ráfordítás, 37 M Ft pályázat)*

2007-ben sikeresen lezárult az AEKI által koordinált OECD-IAEA Paks Fuel Project, amelyben tizenhat ország harminc intézménye vett részt. A külföldi és magyar szakértők számítógépes modellekkel elemezték a 2003. évi paksi üzemzavar lefolyásának termohidraulikai, fűtőelem-viselkedési és aktivitás kikerülési folyamatait. Az elvégzett elemzések segítettek tisztázni az üzemzavar lefolyásának számos részletét és paramétereit. A projekt zárójelentését a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség és az OECD közösen fogja publikálni.

Magas hőmérsékletű kísérleteket hajtottak végre annak megállapítására, hogy más hasadási termékek jelenléte miként befolyásolja a ruténium oxidációját és kibocsátását súlyos baleseti körülmények között. A mérések szerint a cézium jelenléte jelentősen késlelteti a forró levegőben történő, gáznemű ruténium oxidok kibocsátását.

Az AEKI szakértői részt vettek a németországi Karlsruhe-ban végrehajtott QUENCH-13 kísérletben egy aeroszol mintavevő berendezéssel. A kísérlet azt vizsgálta, hogy a számos európai reaktorban használatos ezüst-indium-kadmium szabályozó rudak tönkremenetele hogyan befolyásolja a fűtőelemek sérülését súlyos reaktorbalesetek során. Az aeroszol kibocsátás mérése fontos információkat szolgáltatott a szabályozó rúd megolvadását követő folyamatokról.

Fűtőelem mintákkal végzett kísérletek részletes adatokat szolgáltatottak arról, hogy miként veszti el integritását a fűtőelem, ha a távtartórács, vagy a zónába került idegen test kopást hoz létre a burkolaton. A fűtőelem és a belső rögzítő rugó magas hőmérsékletű kölcsönhatásának vizsgálata rámutatott, hogy sem az eutektikum képződés, sem a képlékeny deformáció nem okoz sérülést magas hőmérsékletű tranziensek során.

Az AEKI-ben kifejlesztett FUROM fűtőelem-viselkedési kódba olyan újabb modellek kerültek beépítésre, amelyek képesek leírni a gadolíniumot tartalmazó üzemenanyag tablettákban végbemenő folyamatokat. A kóddal sikerült reprodukálni az OECD Halden Reactor Project keretében végrehajtott gadolíniumos kísérletek fő paramétereit.

A TRANSURANUS kóddal nagyon részletes post-test számítások készültek a CODEX-CT-1 és CT-2 kísérletekben megfigyelt fűtőelem felfűvódás és felhasadás szimulációjára. Ezzel a kóddal számításokat hajtottak végre a negyedik generációs SCWR típusú reaktorok fűtőelemeinek stacioner modellezésére.

A reaktortartályok üzemidő hosszabbítási programjához a sugárkárosodás elridegítő hatásának ismerete alapvetően fontos. Az EU finanszírozású kutatási témák közül folytatódott az ún. mestergörbe alkalmazása az elemzésekben és a virtuális anyagvizsgáló reaktor fejlesztése. A Paksi Atomerőmű által finanszírozott PTS (nyomás alatti termikus sokk) elemzésekhez szükséges termomechanikai és törésmechanikai számítások befejeződtek.

Részt vesznek az EU finanszírozású COVERS programban, amelynek célja a VVER reaktorok élettartamának meghosszabbításával kapcsolatos ismeretek összegyűjtése és cseréje. A projekt két tudományos munkacsoportjából az egyiket az AEKI vezeti (Szerkezeti anyagok öregedése). Folytatódott a PERFECT programban a törésmechanikai problémák többszálás modellezése. Részt vettek a HOTLAB, AMES, NESC, ATHENA EU hálózatok munkájában, előadásokkal, írott anyagok készítésével és találkozók szervezésével is. A jövőben felépülő Jules Horowitz kutatóreaktor előkészítésével foglalkozó MTR+I3 programban korróziós mérőeszközök és a neutronszűrők fejlesztésében is részt vesznek. A projekt egyik munkacsoportját vezetik (szuperkritikus nyomású besugárzó csatorna fejlesztés).

Az NKTH által finanszírozott NAP NUKENERG programban a fúziós és negyedik generációs fissziós reaktorok szerkezeti anyagainak vizsgálata, valamint fűtőelem-viselkedési számítások folynak. Különböző acélok korrózióállóságát tanulmányozták szuperkritikus nyomású és hőmérsékletű vízben.

*Operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése (7 kutató, 202 M Ft ráfordítás, 43 M Ft pályázat)*

A Paksi Atomerőmű VERONA zónaellenőrző rendszer felújítása 2007-ben az 1. blokkon folytatódott: a négyévente esedékes nagyjavítás alatt az 1. blokkon is üzembe helyezték az új rendszert. A kb. kéthónapos próbaüzem július közepén sikeresen befejeződött, a rendszert ekkor üzemi rendszerré nyilvánították. Ezután az 1. blokkon is végrehajtották azt a munkaprogramot, melynek eredményeképpen a reaktor teljesítménye 108%-ra nőtt. Az 1485 MW zónatelsítmény elérése több lépcsőben, néhány hét alatt történt, eközben már az új rendszer szolgálta ki operatív információval a blokkvezénylőt.

2007-ben elkezdődött az a munka, amelynek eredményeképpen a VERONA rendszerben ma működő reaktorfizikai algoritmusok képesek lesznek kezelni a kiégő mérget (gadoliniumot) tartalmazó, az erőmű által a közeljövőben alkalmazni kívánt új üzemanyagot. Megkezdődött a későbbi teszteléseket kiszolgáló ún. üzemeltetői konfiguráció (az ún. VERONA-t rendszer) fejlesztése. A hardver eszközök beszerzése és összeállítása mellett elkészült a Rendszerterv is.

Folytatódott a Paksi Atomerőműben működő reaktor zajdiagnosztikai rendszerek felújítása is. Ez a munka 2005-ben kezdődött és előreláthatólag 2008-ban, a 2. blokkon fejeződik be. Az 1. blokkon a nagyjavítás alatt telepítették a PAZAR zajdiagnosztikai adatgyűjtő rendszert, így az új rendszer már három blokkon működik üzemszerűen.

A 2008-as telepítés előmunkálatai során sikeresen végrehajtották a 2. blokki konfiguráció ún. gyártóművi tesztjeit is. Megkezdődött a PAZAR rendszerrel gyűjtött zajdiagnosztikai adatok feldolgozására, elemzésére használandó kiértékelő rendszer, a PAZAR-K fejlesztése, elkészült az előzetes Rendszerterv és a szoftver prototípus verziója.

Az Országos Atomenergia Hivatal Nukleáris Biztonsági Igazgatósága (OAH NBI) 2007-ben kezdeményezte az NBI-nél működő CERTA VITA információs rendszer rekonstrukcióját. A

CERTA VITA az NBI Baleset-elhárítási Szervezetének Vészhelyzeti Intézkedési, Gyakorló és Elemző Központját (Centre for Emergency Response, Training and Analysis, CERTA) látja el a Paksi Atomerőmű négy blokkjára vonatkozó technológiai adatokkal (elősorban a baleset-elhárítás szempontjából fontos mért jelekkel). A munka keretében elkészült a felújítás átfogó Konceptióterve és részletes számítástechnikai Rendszerterve.

*Atomerőművi szimulációs kutatások (9 kutató, 114 M Ft ráfordítás, 15 M Ft pályázat)*

Befejeződtek a csőkötegben zajló keveredési folyamatok nagyörvény szimulációi. A számításokat felhasználva analizálták a csőkötegben kialakuló, turbulens áramlásban megjelenő koherens struktúrákat.

Elkészült az AEKI-ben felépített fűtőelemköteg CFD modellje és a PIV mérések kapcsán kapott sebességmezőt összehasonlították a szimulációs eredményekkel. Az eredmények alapján javaslat történt további PIV kísérletek elvégzésére. Ugyancsak megvizsgálták, hogy a képdigitalizáció milyen szisztematikus hibát okozhat a PIV mérésekben mért részecskepályák mért adataiban. Megkezdődtek a fűtött fűtőelemköteg vizsgálatai, melyek során a kapott számításokat a Kurcsatov intézetben végzett mérésekkel vetették össze.

A negyedik generációs erőművek termohidraulikai problémáinak vizsgálatai kapcsán kimutatták, hogy szuperkritikus nyomású víz esetén a hőátadás szempontjából releváns mennyiségeknek (hővezetés, fajhő stb.) a pszeudokritikus hőmérséklet közelében nemcsak a hőmérséklet-, hanem nyomásfüggését is figyelembe kell venni. Ennek a ténynek a tükrében egy új hőátadási korreláció kidolgozását kezdték meg, melynek kiértékelése folyamatban van. Megmutatták, hogy szuperkritikus nyomású közeg esetén a kritikus kiáramlás meghatározására a klasszikusan alkalmazott kritikus kiáramlás modell nem alkalmazható, a hangsebesség hőmérsékletfüggése miatt.

A NURESIM nemzetközi projekt keretein belül javaslatot tettek, hogy a francia kollégák által nemzetközi együttműködésben fejlesztett NEPTUNE-CFD kódba egy anizotrópiát modellezni képes turbulencia modell is beépítésre kerüljön. Részt vettek a beépített modell vizsgálatában.

Modellkísérleteket végeztek csőkötegekben mozgó buborékokkal. Meghatározták azt a buborékméretet, amely alatt a buborékokra ható homlokellenállási erőt nem befolyásolja jelentősen a fűtőelem-pálcák jelenléte. Megmutatták, hogy a csőkötegekben mozgó buborékok milyen kooperatív viselkedést követnek továbbá, hogy alacsony Reynolds szám esetén a buborékok virtuális tömege jelentősen megnő a szubcsatornában.

Kvalitatív és kvantitatív vizsgálatokat kezdtek homogén és heterogén forrás vizsgálatára. Megmutatták, hogy heterogén forrás esetén a falról leváló buborékok átmérője és leválási gyakorisága milyen kapcsolatban van a gravitációs erővel, falnedvesítéssel és áramló közeg esetén az áramlási sebességgel.

Folytatódtak a negatív nyomással és fázisátalakulással kapcsolatos vizsgálatok különböző közegekben. Míg korábban főleg a folyadék–gőz fázisátmenetet vizsgálták (pl. forrás), kutatásaikat most kiterjesztették a folyadék–folyadék, folyadék–üveg és folyadék–szilárd rendszerekre is. Sikerült kidolgozniuk egy modellt, amellyel le lehet írni az üvegátmeneti pont és a fagyáspont nyomásfüggését, akár extrém nyomástartományokban is (a gyakran negatív nyomáson levő stabilitási ponttól gigapascalos pozitív nyomásokig).

Megkezdődött a Paksi Atomerőmű Teljesléptékű Szimulátorának átalakítása. A feladat a teljesítmény növelés második lépéséhez, a gadolíniumos fűtőelemek bevezetéséhez

kapcsolódik. A bevezetés során igen változatos zónakonfigurációk alakulhatnak ki, amelyekhez kapcsolódó szimulátoros oktatás már nem végezhető el a meglévő egyszerű modellekkel. Elkezdődtek a fejlesztések, amelyek segítségével a szimulátorba épül az AEKI-ben fejlesztett KIKO3D 3D neutronkinetikai kód, a RETINA kétfázisú termohidraulikai kód. Ehhez az egész szimulátort át kell építeni egy sokkal nagyobb teljesítményű számítástechnikai környezetbe.

*Anyagtudományi kutatások (10 kutató, 165 M Ft ráfordítás, 21 M Ft pályázat)*

A Budapesti Kutató Reaktornál (BKR) végzett vízkémiai vizsgálatok során NAA (neutron aktivációs analitika) módszerrel vizsgálták korróziós termékek (Al, Fe, Cr, Mn, Cu, Co) koncentrációit a primerköri hűtőközegben és a fűtőköteg tároló medencék vízmintáiban. A vízkémiai paraméterek folyamatos ellenőrzése fontos az esetleges burkolat meghibásodások gyors felderítése és a korróziós folyamatok nyomon követése szempontjából.

Megmérték a dimetilpropilén karbamid nehézvízes oldatainak kisszögű neutronsórását és sűrűségét a koncentráció és hőmérséklet függvényében. Az eredményeket összehasonlították a dimetiletilén karbamid oldatokon végzett korábbi mérések eredményeivel és a különbségeket az elegy molekulái közötti kölcsönhatások alapján értelmezték.

A korábban kidolgozott, a kémiai reakció által gátolt diffúzió folyamataira vonatkozó elméletet továbbfejlesztették az időtől függő esetekre. Az eredmények főként a reaktor fémek korróziójának jellemzésében nyernek alkalmazást.

Modellkísérletekkel meghatározták két primerköri hűtővíz két lehetséges szennyező elemének, a céziumnak és cériumnak a cirkónium és acél felületre történő adszorpcióját leíró izotermát.

Adszorpció/deszorpció vizsgálatokat végeztek, a maximális adszorpció mennyiségének meghatározása céljából, rozsdamentes acél és Zr-1%Nb felületeken  $^{141}\text{Ce}$  izotóppal jelzett bórsavas oldatban nagy-felontású, HPGe alapú gamma-spektroszkópia segítségével.

Az Országos Atomenergia Hivatal támogatásával folytatódott a Zr-1%Nb fűtőelem burkolat lokális korróziójának numerikus modellezése. Kidolgozásra került egy determinisztikus modell, amelynek célja megbecsülni a burkolat anyagának lokális korróziós hajlamát a működő atomreaktor primer körének körülményei között.

Dinamikus neutron radiográfiai módszerrel vizsgálták a víz fizikai tulajdonságait a termodinamikai kritikus pont felett. A magas hőmérsékletű és nagy nyomású mérésekhez olyan mintatartókat terveztek és teszteltek, amelyek a nagy szilárdság mellett átlátszóak a neutronokra. A kutatás célja, hogy a kritikus kiáramlást leíró numerikus modellekhez kísérleti adatokkal járuljon hozzá.

Megtörtént az ENNA (epibóros-NAA) módszer tesztelése geológiai standard referencia anyagokkal, és alkalmazása geológiai eredetű minták vizsgálatára. A meghatározott 22–25 elem esetében, mintegy 17 elemre a mért koncentráció jó egyezést mutat a hitelesített értékkel, az eltérés kevesebb mint 6%. Ismert, hogy geológiai mintákban a Zn-re vonatkozó analitikai eredmények bizonytalansága nagy a  $^{46}\text{Sc}$  izotóp gamma-vonalának ( $E_\gamma$ :1120,5 keV) közelsége miatt. A bóros árnyékolás alkalmazásával a közel 600-szoros Sc elnyomásnak köszönhetően a Zn koncentráció a  $^{65}\text{Zn}$  nuklid ( $E_\gamma$ :1115,5 keV) alapján is jó pontossággal mérhető.

A BNC (Budapest Neutron Centre) program keretében különböző eredetű (régészeti, környezeti, geológiai) minták nyomelem analízisére került sor neutron aktivációs analitikai módszer segítségével. Együttműködtek a Bécsi Egyetemmel (Szervetlen Kémia Tanszék), a környezetvédelem területén pedig az ICPE-CA intézettel (Bukarest) és a MTA Izotópkutató Intézettel.

*Sugárvédelmi és környezetfizikai kutatások (21 kutató, 292 M Ft ráfordítás, 40 M Ft pályázat)*

Az AEKI-ben kifejlesztett *Pille-MKSz* dózismérő rendszerrel, mely a Nemzetközi Űrállomás (ISS) orosz modulján a dozimetriai szolgálati rendszer része, 2003 óta folyamatosan végeznek méréseket a dóziseloszlás feltérképezésére, mérik az űrhajósok személyi dózist őrület alatt és rendkívüli naptevékenység idején, illetve részt vesznek fedélzeti kísérletekben (ESA: Matroshka). Mint minden évben, 2007-ben is a nyert több ezer mérés eredményét feldolgozták és nemzetközi konferenciákon, folyóiratokban publikálták.

A *PorTL* továbbfejlesztése: az MTA kutatásfejlesztési támogatásával elkészültek a kevert (gamma + neutron) sugárzási térben létrejövő albedo személyi dózis egyszerű mérésére alkalmas ún. ikerpatron mechanikai és elektromos tervei, valamint dózismérő blokkjának prototípusa többféle változatban. Dozimetriai elővizsgálatokat végeztek a doziméter termikus neutron árnyékoló tokjának kifejlesztéséhez. A kifejlesztett dózismérő várhatóan kereskedelmi forgalomba kerül, melyet az AEMI Atomenergia Mérnökiroda Kft. hasznosít.

Az ESA *Rosetta* űrszondájának leszálló egységére, mely 2014-ben éri el a Csurjumov-Geraszimenko üstököst, az AEKI közreműködésével két műszer is készült (a *ROMAP/SPM* plazma- és a *SESAME/DIM* pordetektor). 2007-ben is többször elvégezték a műszerek repülés alatti ellenőrzését, a teszt-adatok kiértékelését. Folytatták a további tesztek és a leszállási program előkészítését, valamint a mérőműszerek földi kalibrálását.

A 2007-ben szervezett Foton-M3 Biopan-6 bioszatellit kísérletben (ESA) felkérést kaptak a teljeskörű sugárdozimetriai ellenőrzés végzésére. A fő cél, hogy meghatározzák a kozmikus sugárzás mélységi eloszlását biológiai objektumokban, valamint a földi légkörben másodlagosan keletkező neutronok fluxusát és spektrumát. A kísérlet 2007 szeptemberében sikeresen lezajlott, a mérések kiértékelése jelenleg is folyamatban van.

A sugárzási tér dózisa az űrhajósok esetében jelentős kockázati tényező, így nagy hangsúlyt kap a tér paramétereinek meghatározása. Az elmúlt évben folytatódott a  $4\pi$  térszögben közel egyenletes érzékenységgel rendelkező háromtengelyű szilícium detektoros űrdozimetriai teleszkóp, a TriTel fejlesztése. A készülék nagy előnye, hogy az elnyelt dózis mellett a lineáris energiaátadási tényező és a sugárzási minőségi tényező meghatározására is alkalmas.

Az atomerőmű csőtöréssel járó üzemzavarai esetén jelentős mennyiségű radionuklid jut a hermetikus térbe, aminek egy része a hermetikus tér szivárgása révén az erőmű helyiségeibe és végül a szabadba kerülhet. Az elmúlt évben elkezdődött egy olyan komplex modell fejlesztése, mely képes az atomerőmű üzemzavara során a primer körből kikerülő aktivitás hermetikus téren belüli transzportjának követésére.

Meghatározták a Ferihegyi repülőtér és környezete főbb emissziós forrásait és felvették a repülőtérre jellemző porkibocsátási katasztert. A repülőtér domborzati viszonyainak, valamint épített környezetének figyelembevételével adaptálták a légszennyezők terjedését leíró diszperziós modellt (Emission Dispersion Modelling System Airport, EDMS Airport) a légiforgalom, a földi kiszolgálás és a repülőtérre érintő külső gépkocsiforgalom adatainak



felhasználásával. A mérés-technikai fejlesztések a nagy időfelbontású (1-2 perc) és a repülőtéri forrásokra jellemző szubmikron mérettartományt célzó mintavételi és kémiai analitikai módszerekre irányultak. Megépítették és kalibrálták az előző év során kifejlesztett aeroszolmérő berendezést. A későbbi nagyérzékenységű kémiai analitikai vizsgálatokhoz (totálreflexiós röntgen fluoreszcencia, TXRF) szükséges standard mintákat nanoszkópikus litográfiai módszerrel alakították ki.

A kifejlesztett mérőberendezések prototípusait összehasonlítás céljából független gyártók kereskedelmi forgalomban kapható készülékei mellett üzemeltették. A referencia mérésekre változatos időjárási feltételek mellett került sor. Ezen túlmenően a műszereket egy PZL 101 (Gavron) típusú sportrepülőgépre is beépítették és feltérképezték a légszennyezők függőleges irányú eloszlását a Ferihegy repülőtér több pontja felett.

Több közcélú szereplés során ismertették a környezetvédelmi hatósággal, a lakossággal és a civil szervezetekkel a munka részeredményeit. Az MTA Környezetkémia Bizottsága 2007 áprilisában az Országos Meteorológiai Intézet székházában egynapos rendezvényt szervezett a projekt eredményeinek bemutatására. A projekt honlapja: [www.legkor.hu](http://www.legkor.hu).

A villamosenergia-termelés környezeti külső költségeinek számítására szolgáló hatásútvonalmodell földrajzi kiterjesztése és aktualizálása céljából elvégezték a receptorokra vonatkozó adatok frissítését Magyarországra és a szomszédos országokra. A modellbe a legújabb dózisszámítási eredményeket építették be. A modellel végzett számítások alapján Magyarországon a füstgáz-kéntelenítők üzembe lépése és a kazánfelújítások után a lignitalapú villamosenergia-termelés környezeti külső költsége tizenötödére, a szénalapú pedig huszonötödére csökkent. A magyarországi nagyobb fosszilis erőművek környezeti hatása hasonlóvá vált a nyugat-európai fosszilis erőművekéhez. A nem-nukleáris eredetű balesetek járulékát magyarországi baleseti statisztikai adatok feldolgozásával vették figyelembe. A magyarországi szénbányászat a világszerte viszonyítva harmadannyi halálos balesettel járt. A munka legfőbb gazdasági-társadalmi haszna, hogy a környezeti külső költségek számításával a meglévők összehasonlításán kívül a tervezett új villamos erőművek is értékelhetők környezeti hatásuk alapján.

Az ionizáló sugárzások kis dózisa biológiai hatásának vizsgálatához kifejlesztettek egy realiztikus légúti geometriájú, három-dimenziós, numerikus áramlástan (CFD) technikát alkalmazó mikrodozimetriai modellt. Ehhez a Semmelweis Egyetem Patológiai Intézete és az OSSKI közreműködésével bronchiális öntvények mikro-CT-s analízisével numerikusan előállították a légutak realiztikus geometriáját. Az emberi légzőrendszer geometriájának numerikus előállítása közvetett gazdasági haszon forrása egyrészt a kutatócsoport kockázati modellje pontosságának javítása, másrészt az aeroszol gyógyszerek részecskeméretének és bevételi módjának optimalizálása révén.

Az ionizáló sugárzások lineáris küszöb nélküli (linear-non-threshold, LNT) dózis – hatás hipotézise érvényességének tanulmányozásához az intézetben kidolgozott CFD alapú mikrodozimetriai modellt továbbfejlesztették, hogy nagyszámú radon leánytermék inhalációjakor bekövetkező sejterheléseket is jellemezhesse. Az új módszert alkalmazva megvizsgálták az egyszeres és a többszörös sejttalálatok szerepét a biológiai hatások szempontjából, mind lakossági, mind uránbányában elszennvedett terheléseknél. Az eredmények azt sugallják, hogy a terhelés és a sejthalál, valamint a terhelés és a sejtranszformáció tekintetében érvényes az LNT összefüggés. E kutatások gazdasági haszna főként az ionizáló sugárzások kis dózisa biológiai hatásának jellemzéséből adódik.

*A Budapesti Kutatóreaktor működésének fő eredményei (7 kutató, 686 M Ft ráfordítás, 101 M Ft pályázat)*

A „user program” keretében hazai és külföldi kutatók pályázhatnak a Budapest Kutatóreaktor nagyberendezéseinek mérési időre. Kutatási pályázatot évente kétszer lehet benyújtani elektronikus úton, május 15-ig és október 15-ig. A pályázati forma letölthető a Budapest Műszerközpont (Budapest Neutron Centre) honlapjáról, [www.bnc.hu](http://www.bnc.hu). A beérkezett pályázatokat egy nemzetközi bírálóbizottság értékeli és rangsorolja. A pályázatok elbírálásának fő szempontjai a tudományos érték, az új kutatási téma, Ph.D vagy diplomamunka. Az évente beérkező rendkívül nagy mérési idő igény miatt csak a kiváló és jó pályázatok számára tud a Műszerközpont mérési kapacitást biztosítani.

2004-től a Budapest Műszerközpont résztvevője az NMI3 – The Integrated Infrastructure Initiative for Neutron Scattering and Muon Spectroscopy programnak. Az Európai Közösség által támogatott 4,5 éves program fő célkitűzése, hogy hatékonyabbá tegye az európai neutron és muon berendezések használatát. Az NMI3 program keretében a Budapest Kutatóreaktor körüli nagyberendezéseken mérési időre lehet pályázni, és a program kritériumainak megfelelő pályázók az ingyenes nyálábidő mellett, utazási támogatást is kapnak.

2007-ben a BKM az EU feltételeknek megfelelő pályázatok közül 23-et támogatott, 145 reaktornappal és 24 kutató számára biztosított mérési lehetőséget. Néhány érdekes téma a 2007-ben végzett régészeti és anyagszerkezeti kutatások közül:

- Perui múmiából származó haj- és bőrminta nyomelem koncentrációjának meghatározása.
- Újkőkorszakból (Neolitikum) származó kőszerszámok összetételének vizsgálata.
- Római korból származó bronz tárgyak vizsgálata.
- Lézerrel kezelt alacsony széntartalmú acélok mikroszerkezetének vizsgálata.
- A polimer gélek szerkezetének kutatása. Ezek az anyagok kitűnő modell objektumok a víz transzportjának tanulmányozására a molekuláris biológiában fontos szerepet játszó komplex rendszerekben.
- Nano- és mikrokristályos oxidok atomi és mágneses szerkezetének felderítése.

Az Európai Közösség által támogatott NMI3 program 2008. június 30-án fejeződik be. Jelenleg, az FP7-es keretprogram pályázatán dolgoznak.

#### *Az eredmények gazdasági-társadalmi haszna*

A kutatások és fejlesztések eredményei alapvetően két területen hasznosulnak. Az első terület a magyar atomerőmű, ahol a kutatási eredmények egy része közvetlenül hasznosul. A másik terület a magyar nukleáris hatóság (OAH), ahol az eredmények hasznosulási formája az ellenőrzés, az engedélyezés és a felügyelet minőségének javulása. Mindezekben a területeken azonban jelentős az eredmények nemzetközi hasznosulása is.

Az eredmények hasznosulásának új, valóban nagy jelentőségű területe lehet az új típusú energiatermelési módok kutatása, kifejlesztése. Ezen a területen döntő esemény a 2005-ben az NKTH által kiírt NAP-2005 pályázaton elnyert hároméves támogatás, ami lehetővé teszi, hogy az intézet bekapcsolódjon a negyedik generációs atomerőművek kifejlesztésére irányuló nemzetközi erőfeszítésbe. A NAP-2005 biztosítja az intézet szerény mértékű részvételét a távlatilag legperspektívikusabb energiatermelési mód, a magfúzió alapuló erőmű kutatásában is.

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 Kémiai Intézetének és a Pannon 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.

Nemzetközi kapcsolataik fontos részét képezi az EU projektekben való részvétel, kiterjedt nemzetközi kapcsolataik vannak számos kutatóintézettel és egyetemmel, elsősorban Európában, de a tengerentúlon is.

Az intézet kutatási céljainak eléréséhez jelentősen hozzájárultak a kutatók külföldi útjai a nemzetközi projektekben való részvétel miatt, de egyéb szempontokból is. Az MTA kétoldalú egyezményes útjai különösen jelentős szerepet játszottak. 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 intézet jövője szempontjából a legfontosabb a NAP-2005, amely három évre biztosítja a perspektivikus energiatermelési mód (negyedik generációs atomerőművek, fúzió) kutatásának lehetőségét. Az NKFP és GVOP pályázatok fontos szerepet játszanak az intézet témaválasztékának bővítésében.

Az elnyert nemzetközi pályázatok mintegy fele az EU keretprogramjaiból származik és ezek jelentősége abban áll, hogy a korszerű atomenergetikához kapcsolódó nemzetközi kutatásokhoz biztosít kapcsolatot. A legnagyobb összegű EU pályázat a kutatóreaktor európai hasznosítását teszi lehetővé. Jelentős a fúziós (EFDA) valamint az űrelektronikai pályázatok szerepe is.

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

1. Kliem, S, Danilin, S, Hamalainen, A, Hádek, J, Keresztúri, A, Siltanen, P: Qualification of Coupled 3-D Neutron-Kinetic/Thermal-Hydraulic Code Systems by the Calculation of Main-Steam-Line-Break Benchmarks in an NPP with VVER-440 reactor. Nuclear Science and Engineering, 157: 280–298, Füzet: 3 (2007)

2. Szabados, L, Ézsöl, Gy, Perneczky, L, Tóth, I: Results of the Experiments Performed in the Pmk-2 Facility for VVER Safety Studies, Akadémiai Kiadó, Budapest (2007)
3. Kunstár, M, Matus, L, Vér, N, Pintér, A, Hózer, Z, Steinbrück, M, Stuckert, J: Experimental Investigation of the Late Phase of Spent Fuel Pool Accidents. Int. J. Nuclear Energy Science and Technology: 3, 3: 287–301 (2007)
4. Hózer, Z, Gadó, J, Somfai, B, Szabó, E, Elter, J, Nagy, L: Safety Analysis of a VVER-440 Spent Fuel Storage Pool. Int. J. Nuclear Energy Science and Technology, 3, 3: 302–313 (2007)
5. Gillemot, F, Horváth, M, Úri, G, Fekete, T, Houndeffo, E, Acosta, B, Debarberis, L, Viehrig, H-W: Radiation stability of WWER RPV cladding materials. International Journal of Pressure Vessels and Piping, 84, 8: 469–474 (2007)
6. Nagy, G, Kerner, Zs, Schiller, R: Interpretation of EIS data on passive steel surfaces in aqueous sulfuric acid solution in terms of carrier migration and recombination Eletrochim. Acta 53: 1737–1742 (2007)
7. Nagy, G, Gordillo, MC, Guardia, E, Marti, J: Liquid water confined in carbon nanochannels at high temperatures. J. Phis. Chem B 111: 12524–12530 (2007)
8. Jákli, Gy: The H<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>O solvent isotope effects on the molar volumes of alkali-chloride solutions at  $T=(288.15, 298.15, \text{ and } 308.15)$  J. Chem. Thermodynamics 39: 1589 (2007)
9. Major Cs, Horváth Cs, Végh J: Development and operation of the new core monitoring system at Paks NPP, Proc. of the Enlarged Halden Programme Group Meeting, Session C5.7, 11–16 March, 2007, Storefjell, Norway.

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: KFKI Atomenergia Kutatóintézet

Átlagléttség <sup>1</sup> :	194	Ebből kutató <sup>2</sup> :	94
PhD, kandidátus:	22	MTA doktora:	4
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			25
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			145
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			130
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	42
nemzetközi együttműködés keretében:	35	SCI által regisztrált folyóiratban:	42
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	56,229	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	123
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			107
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	1	könyvfejezet:	2
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	8
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	88	posztterek száma:	23
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	2	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	5	Gyakorlati kurzusok száma:	4
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	5
			580
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			755,3 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	5	Teljes saját bevétel:	1298 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	6,2 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			4
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	33,8 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	97,5 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	52,1 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			18
EU forrásból:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	78,9 MFt
Egyéb:	8	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	44,4 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			46
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	543,7 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			139,7 MFt

## KFKI RÉSZECESKE- 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 részecskefizika, a magfizika, 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, plazmadiagnosztika, űrtechnika, gyors adatfeldolgozás, spektroszkópia, speciális elektronikus, mechanikai és információ-technológiai eszközök, szoftver-fejlesztés. Működtette és fejlesztette nagyberendezéseit, az EG-2R gyorsítót, a hozzá kapcsolt NIK nehézion-implantert, a molekulanyaláb-epitaxia berendezést, a kutatást és a kapcsolatokat szolgáló GRID rendszerű és más nagykapacitású számítógépes hálózatait. Fenntartotta, működtette és fejlesztette a KFKI Telephely számítástechnikai hálózatát, fejlesztette az annak biztonságát erősítő eszközöket, és ellátta a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Program regionális központi feladatait.

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

*Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion fizika.*

A nagyenergiájú részecske- és nehézion fizikai kísérleti kutatások döntő része CERN együttműködésekben folyt. Miután a hamarosan induló LHC kísérletekhez a mérőberendezések megépítése nagyrészt befejeződött, 2007-ben a fizikai analízishez szükséges szoftverek elkészítése volt a hangsúlyos feladat.

Az LHC CMS kísérlet keretében kidolgozták a töltött részecskék nyomkövetését egy igen széles impulzustartományban ( $0,2 < p_T < 20 \text{ GeV}/c$ ). Jelentősen sikerült lecsökkenteniük a kiértékelést zavaró tévesztéseket (fake track rate). Kidolgoztak egy, a részecskék azonosítására, ill. hozamuk meghatározására szolgáló módszert (dE/dx mérések levágott átlagolása). Így a pionok és kaonok spektruma  $0,8 \text{ GeV}/c$  alatt, a protonoké pedig  $1,5 \text{ GeV}/c$  alatt 7-9% becsült szisztematikus hibával meghatározhatóvá vált. Véletlen triggert használva az inelasztikus proton-proton ütközések mintegy 88%-a megfigyelhető lesz. Elkészítették a fizikai analízist végző szoftvereket is. (6 FTE; RMKI: 28 M Ft, OTKA: 5 M Ft, NKTH: 5 M Ft)

Az LHC ALICE együttműködésben – olasz kollégákkal – tesztelték, majd üzembe állították a nagy impulzusú részecskéket azonosító HMPID detektort és az adatok off-line analízisét biztosító szoftvert. GEM-laboratóriumukban kimérték egy új fejlesztésű vastag GEM (TGEM) típusú elektronsokszorozó rendszer legfontosabb paramétereit (jel/zaj viszony,

beütések korrelációi, szikrák utáni holtidők), megépítettek egy TGEM alapú teszt-detektort. (8 FTE; RMKI: 20 M Ft, OTKA: 13 M Ft, NKTH: 5 M Ft).

Az RMKI kutatói bekapcsolódtak az LHC TOTEM együttműködés munkájába is, ahol egyrészt az adatgyűjtő rendszer kifejlesztéséhez, másrészt a CC Mezzanine chip megalkotásához járultak hozzá. Ráfordítások: 1 FTE; RMKI: 5 M Ft, CERN: 6 M Ft.

Az OPAL együttműködés keretében megmérték a töltött hadronok inkluzív keletkezési hatáskeresztmetszetét a foton-foton ütközésekben, és megmutatták, hogy azt – az L3-kísérlet eredményeivel ellentétben – a kvantum-szindinamikai modellek kielégítően leírják.

Az ASACUSA együttműködésben a lézerrendszer fejlesztésével és a kétfoton-spektroszkópia megvalósításával tovább pontosították az antiproton tömegének, töltésének és mágneses momentumának mérését, eredményeikről összefoglaló cikket publikáltak. Elkészítették és a CERN-ben telepítették az épülő antihidrogén-csapda pozicionáló állványát. (1,5 FTE; RMKI: 4 M Ft, OTKA: 5 M Ft).

2000 óta először 2007-ben indultak az LHC kísérletektől független új kísérletek a CERN-ben. Elismerő siker, hogy az SPS gyorsítón elfogadott első kísérlet a magyar-lengyel irányítású NA61 "SHINE" projekt lett, melynek első mérési periódusa 2007. októberében eredményesen zárult. Reaktiválták a NA49 kísérlet felhasználásra kerülő elemeit és elkészült az a DDL-adapter, amellyel igazolták, hogy az adatgyűjtési sebesség egy nagyságrenddel megemelhető. A T2K neutrínó-kísérlet részére grafit céltárgyon közel  $10^6$  kölcsönhatást sikerült rögzíteni.

A darmstadti GSI-ben sikeresen folytatódott a FOPI-kísérlet RGPC detektorainak üzemi körülmények közötti tesztelése, s megkezdődött a kaonok és antikaonok keletkezésének vizsgálata Ni+Ni ütközésekben 1.93 AGeV energián. (1 FTE, 2,1 M Ft).

Hazai és nemzetközi szempontból is fontos eredmény, hogy 2007. év végére az RMKI „grid-farmja” több lépcsőben bővülve (25 Quad-processzor, 10 TB lemezkapacitás, 4 kapcsoló-switch beállításával) csaknem 300 processzorral és 40 TB tárolókapacitással elérte a Worldwide LHC Computing GRID hálózat által megkövetelt elsődleges adatanalízáló (T2) állomás szintjét. Ez jelentős hatással lesz a GRID-kultúra hazai elterjesztésére mind a tudományos kutatásban, mind pedig szélesebb felhasználásában (ipar, kereskedelem, gyógyászat, stb.). Sikeresen bekapcsolódtak az ALICE és CMS CERN kísérletek adatkezelésének előkészítésébe, a GRID alapú szimulációs számolásokba. (3 FTE; EU-támogatás: 20 M Ft).

A sokrészeszkés dinamika fenomenológiai leírásában hatványfarkú multiplicitás eloszlásokat vizsgáltak a Poisson-klaszter képben, exponenciális levágással. Rámutattak az aszimptotikus (levágatlan) és a kísérletileg mért rapiditás-gap valószínűség arányának szelektív erejére a hadronkeltési modellek körében. Aszimptotikusan fixpont tulajdonságú sűrűségfluktuációkból kiindulva magyarázatot adtak a negatív binomiális eloszlás univerzális előfordulására. Ráfordítások: 1 FTE; RMKI: 3 M Ft.

A Brookhaveni Relativisztikus Nehézion Ütköztető (RHIC) gyorsító PHENIX kísérletében már korábban azt találták, hogy az Au+Au ütközésekben keletkező kvark és gluon anyag leginkább úgy viselkedik, mint egy „tökéletes folyadék”. Most a kinematikai viszkozitás

meghatározásával számszerűsítették is a „tökéletesség” fokát. A bájos kvarkok diffúzióját vizsgálva megmutatták, hogy ez a különleges anyag legalább négyszer jobban folyik, mint az eddig ismert legkisebb kinematikai viszkozitású ismert folyadék, a szuperfolyékony Helium-4. Ráfordítások: 1 FTE; RMKI: 5 M Ft, OTKA: 3 M Ft.

#### *Anyagtudomány kísérleti magfizikai módszerekkel*

Az anyagtudományi témacsoport feladata az volt, hogy elsősorban magfizikai módszerekkel kísérleti alapkatásokat végezzen az anyagtudomány területén és fejlessze az ehhez szükséges kísérleti és elméleti hátteret. A molekulanyaláb-epitaxia (MBE) berendezés az év folyamán már üzemszerűen működött; összesen 62 minta készült. Az MTA SZFKI-val együttműködésben előállítottak egy  $^{57}\text{FeAg}$  ötvözetréteg-sorozatot; készítettek még antiferromágnesesen csatolt  $^{57}\text{Fe/Cr}$  rendszereket, valamint  $^{\text{nat}}\text{FePd}/^{57}\text{FePd}$  izotóp multirétegeket is. Fejlesztéseik eredményeképpen a rétegnövesztés mára teljesen automatizálttá vált.

A rétegvastagság függvényében meghatározták a nagy mágneses alagút-ellenállást mutató  $\text{Fe/MgO/Fe}$ , illetve az új mágneses szenzorok és antiferromágneses adattárolók fejlesztésénél fontos  $\text{Fe/Si}_x\text{Fe}_{(1-x)}$  vékonyréteg-rendszerek kialakulása során létrejött fázisokat, valamint az alkotók kölcsönhatását. Igen kis mennyiségű  $\text{Fe}^{3+}$  ionokat tartalmazó  $\text{PbTi}_{0.4}\text{Zr}_{0.6}\text{O}_3$  piezoelektromos kristályban széles hőmérsékleti tartományban meghatározták az izolált  $\text{Fe}^{3+}$ -vakancia, illetve klaszter formájában lévő vas arányát. A klaszterek mágneses relaxációs effektust mutattak. (3 RMKI-s kutató, 25,5 M Ft RMKI költségvetési, 1,2 M Ft külföldi intézeti forrás).

Átmenetifém-vegyületek spinállapotát vizsgálták röntgenemissziós spektroszkópiával. A Föld köpenyének egyik fő alkotója, a  $(\text{Fe,Mg})\text{O}$  ferroprikász vasának spinállapota a köpenybeli hőmérséklet- és nyomásviszonyok között fokozatosan változik, ami valószínűleg ezer kilométernél is szélesebb átmeneti zóna keletkezéséhez vezet. Az alacsony hőmérsékleten fényel kapcsolható spinállapotú  $\text{Fe}(\text{o-fenantrolin})_2(\text{NCS})_2$  molekulát vizsgálva alternatív kapcsolási mechanizmust találtak. A fenti eredményeket 13 kutató érte el (ebből 1 RMKI-s) 4,2 M Ft RMKI költségvetési és 0,5 M Ft pályázati forrás felhasználásával.

MBE berendezésükön  $\text{Fe/Ag}$  kettősrétegeket készítettek egyidejűleg Si, illetve MgO hordozóra. Kimutatták, hogy MgO hordozón epitaxiális, míg Si hordozón polikristályos fémrétegek alakultak ki. Megállapították, hogy az ezüst polikristályos vasrétegre történő leválasztása során a határfelületen létrejön egy kevert réteg, míg ugyanez epitaxiálisan növesztett vasréteg esetén nem figyelhető meg. A keveredést így a szemcsehatár-diffúzióknak tulajdonították. A magas hőmérsékleten növesztett minták felülete sejtyszerűen töredezett lett. A töredezett rétegen felvett visszaszórásos spektrumokat a – korábban a porózus anyagokra kifejlesztett – RBS-MAST programmal értelmezték. Megállapították, hogy az ezüstréteg leválasztási hőmérsékletének növelésével a vasrétegre jutott ezüstatomok száma a polikristályos mintáknál megkétszereződött, míg az epitaxiális minta esetében egyáltalán nem volt keveredés. A fenti eredményeket 5 kutató érte el (ebből 4 RMKI-s) 9,8 M Ft RMKI költségvetési és 1,5 M Ft pályázati forrás felhasználásával.

Jelentősen továbbfejlesztették az általuk a korábbi években bevezetett módszer, a szinkrotron-Mössbauer-reflektometria (SMR) diffúz szórásának elméletét, ami egyben a



neutronreflektometriai kiértékelés számára is új távlatot nyit. A FitSuite sokfunkciós illesztőprogramot, amely a fenti elméletet, valamint az SMR-en és a polarizált neutronreflektometrián kívül számos további vékonyréteg-vizsgálati módszer kiértékelését is tartalmazza, saját internetes honlappal ([www.fs.kfki.hu](http://www.fs.kfki.hu)) elérhetővé tették a nemzetközi kutatóközösség részére is.

FePd filmek anizotrop diffúziójának és szerkezetmódosító ionimplantációjának vizsgálata az információátvitel új fejlesztési útjainak kutatási hátterét képezik. Könnyű ionok ( $\text{He}^+$ ) kisenergiás implantációja segítségével egyedülálló módszert dolgoztak ki a diffúziós állandó meghatározására metastabil ötvözetekben, amorf vékonyrétegekben.

A magyar vállalatok nagy összegű beszállítását biztosító – installációját követően az európai pályázati rendszerbe bevonandó – polarizált neutronreflektométer építése harmadik, utolsó évébe lépett. 2007-ben megoldották a reflektométer mozgatásának számítógépes vezérlését. A fenti eredményeket 11 fős kutatócsoport érte el (ebből 7 RMKI-s) 54,6 M Ft RMKI költségvetési és 22,7 M Ft pályázati forrás felhasználásával.

Az általuk kifejlesztett, telítési szintű pozitron- és pozitroniumbefogódási modell alapján zeolitokban végzett pozitron-élettartam-mérések elemzésével megállapították, hogy gélből történő előállítás során a zeolitszerkezet latens kialakulása következik be. Kimutatták, hogy ionbesugárzás hatására porózus anyagokban nagy mennyiségű lokalizált ionizált szennyezés keletkezik, ami a hosszú élettartamú o-Ps-komponens eltűnését okozza; ez a jelenség az adott ionokra vonatkozóan koncentrációbecslést tesz lehetővé. Horvát kutatókkal kooperációban kifejlesztettek egy teljes eseménytárolásra alkalmas pozitronélettartam-spektrométert, amely Zágrábban fog működni. A fenti eredményeket 6 kutató érte el (ebből 2 RMKI-s) 16,8 M Ft RMKI költségvetési és kb. 3,2 M Ft pályázati forrás felhasználásával.

### *Elméleti fizika*

A neutroncsillagok belsejében lévő nagysűrűségű anyag leírásakor az erős, az elektromos és a gravitációs kölcsönhatásokat egyszerre kell figyelembe venni. Ezek az erők közösen hozzák létre az egymás fölötti rétegekben elhelyezkedő egyensúlyi állapotokat, melyeket három dimenzióban a Tolman-Oppenheimer-Volkov (TOV) egyenlet határoz meg. A femtométeres nagyságú, véges kiterjedésű, felcsavarodott (ún. kompaktifikált) extra dimenziókra, s ezek LHC gyorsító energiáján lehetséges megjelenésére vonatkozó hipotézisek alapján megvizsgálták a neutroncsillagok, mint természetes laboratóriumok viselkedését abban az esetben, ha a három térdimenziót kiegészítjük egy kompaktifikált extra dimenzióval, melynek sugarát a ritkaság kvantumszám jelenlétekor látott tömegkülönbséghez kapcsolták. A  $3+1_c$  dimenzióban felírt egyenletekből meghatározták az így módon definiált hiperoncsillagok jellemző sugarát és tömegét, és kimutatták, hogy ezek az asztrofizikai objektumok a proton méretű extra dimenziók bevezetése mellett is léteznek, de a neutroncsillagoknál sűrűbbek és kisebb sugarúak. (2 FTE, 10 M Ft RMKI, 2 M Ft OTKA, 1 M Ft MTA-Dubna)

Az Einstein-féle gravitációelméletben olyan új matematikai formalizmust vezettek be, amely lehetővé teszi az összes stacionárius fekete lyukra jellemző, horizonttal rendelkező téridő-modell egyidejű hatékony vizsgálatát. Az új módszert ún. „deformált fekete lyukak” vizsgálatára alkalmazták, és a természetben előforduló tulajdonságokkal rendelkező anyagot feltételezve, valamint nem nulla kozmológiai állandót is megengedve, bármely  $n > 3$  téridő-

dimenzió esetére meghatározták a teljesen általános deformált fekete lyukak horizontjának lehetséges topológiai tulajdonságait. Négy dimenzió esetében megmutatták, hogy az összes lehetséges, nem-degenerált, elektrovákuum deformált fekete lyuk – így a teljes téridő-geometria és a hozzá tartozó elektromágneses mező is – egyértelműen meghatározott a fekete lyuk horizontjának bármely kétdimenziós szelésén indukált metrika, valamint az egyik elektromos potenciál ottani értéke által. Így a vizsgált rendszerekben elsőként sikerült a valódi fizikai szabadsági fokokat meghatározniuk. (2 FTE, 8 M Ft RMKI, 1,5 M Ft OTKA)

Az Einstein-féle gravitációelméletben - svéd kutatókkal együttműködve - forgó neutroncsillag modelleket, ezen belül Petrov D típusú folyadékmegoldásokat vizsgáltak. Megmutatták, hogy a görbület viselkedésére vonatkozó matematikai feltétel megadása a csillag állapot-egyenletének megadásával egyenértékű, és numerikusan megadták a konfigurációs tér számos elemét. Megmutatták, hogy a gömbszimmetrikus alapmegoldás paraméterei és a forgás szögsebessége egyértelműen meghatározza a forgó megoldást. (1 FTE, 5 M Ft RMKI, 1,5 M Ft OTKA)

Részletesen megvizsgálták az integrálható modellekben tapasztalható ún. klaszterezési tulajdonságot: ha a részecskék egy csoportját felgyorsítjuk a maradékhoz képest, a megfelelő form-faktorok szorzat alakba mennek át. A fenti tulajdonságot, amely döntő fontosságú a mélyen rugalmatlan szórás kis- $x$ , más néven Bjorken-aszimptotikájának meghatározásában, általánosították tetszőleges  $O(n)$  modellek esetére és példákat dolgoztak ki  $n = 3$ ,  $n = 4$ , valamint  $n = \infty$  esetére. (1 FTE, 7 M Ft RMKI)

#### *Plazmafizika és hűtött atomok fizikája*

A plazmafizikai kutatások továbbra is három területre összpontosultak: a mágnesesen összetartott fúziós plazmák vizsgálatára, a plazmákban intenzív lézerekkel keltett folyamatok tanulmányozására, valamint atomok csapdázására és atomi állapotok manipulálására lézerek segítségével. A kutatómunkát kiegészítette az elmúlt években megerősödött fúziós technológiai kutatás-fejlesztés, mely európai nagyberendezéseken zajlik. A mágnesesen összetartott plazmák kutatásában a KFKI RMKI az EURATOM fúziós program magyarországi koordinátora. (20 kutató és 8 mérnök, 100 MFt RMKI, 221 MFt EURATOM, 25 M Ft NKTH, 0,8 M Ft NAÜ, 9,4 M Ft OTKA támogatás).

2007-ben a svájci TCV tokamakon egy újonnan kifejlesztett tomográfiás eljárás segítségével jó térbeli és időbeli felbontással a teljes plazmakeresztmetszetben meghatározták a fúziós erőművekben kritikusnak tekintett ELM (Edge-Localized Mode) instabilitások alatt a kibocsátott sugárzás dinamikáját. Megállapították, hogy a plazma szélén a fluktuációk az ELM-ek közötti és alatti fázisban nagyon hasonlóak. Az ASDEX Upgrade tokamakon III-as típusú ELM-ek esetében meghatározták a belőtt deutérium pelletek által keltett ELM-ek időközét. A plazmában ablálódó pelletek sugárzását vizsgálva megállapították, hogy a lerakódó anyag alacsony energián sugároz, 1 keV feletti foton energián viszont a háttér plazma sugárzása csökken, amit a pellet plazmára gyakorolt hűtő hatása okoz. Megbecsülték a szennyező pelletek által hűtött plazmában keletkező nagyenergiás „runaway” elektronok számát. Habár JET plazmákban a plazma vészleállítása során a runaway elektronok keletkezése szén pelletek belövésével elkerülhető, a plazmaáram kioltása nem megfelelő.

A MAST szférikus tokamakon nyalábemissziós spektroszkópiai mérőberendezést építettek ki és a lavina-fotodióda detektorokkal már méréseket is végeztek. Így meghatározható a plazma szélének turbulenciája, és jó időfelbontással vizsgálható az ELM-ek, illetve filamentumok terjedése. A TEXTOR tokamakon épített lítium atomnyaláb diagnosztikával először sikerült az atomnyaláb fényét kamerával detektálni a plazmában. Megtervezték a gyors mérésekhez szükséges lavinadetektor rendszert.

A Wendelstein 7-X sztellarátor videódiagnosztika tervezésénél elkészült a kamerát a berendezés megfigyelő portjába bejuttató mechanika teszt-példánya. BME és AEKI együttműködésben befejezték a kamera-fej teszt-verziójának sugárzási próbáit s megállapították, hogy az új technológia várhatóan többéves sugárterhelést is kiáll.

A jövő egyik legnagyobb nemzetközi fúziós kísérletében – az ITER tokamakon – az RMKI a felelős a tomografikus mérési lehetőségek meghatározásáért és a mérőcsatornák elrendezéséért. Ennek keretében optimalizálták a bolométer diagnosztika mérőelrendezését, meghatározták a röntgen-kamerák tomografikus visszaállítási lehetőségeit és a javasolt függőleges neutron kamera hatékonyságát. Az ITER-hez kapcsolódó 8 európai plazmadiagnosztikai projekt közül az RMKI négyben nyert el részvételt. Ennek keretében 2007-ben elkészült a video diagnosztika és a töltéscsere diagnosztika első megfigyelő tükrének, a bolométer diagnosztika divertorba szerelendő kameráinak, valamint a LIDAR diagnosztika optikai alagútjának koncepció s terve és termikus szimulációja. Az ITER európai trícium termelő kazetta (TBM) programban az RMKI készítette el a karbantartási séma és az ITER-be való integrálás koncepcióját, melyet az RMKI munkatársai az építés helyinén koordináltak. A TBM konzorciumban az RMKI kutatója lett az ITER integrálás- és diagnosztikai terület vezetője. A demonstrációs fúziós tokamak erőmű (DEMO) fejlesztői csapatában az RMKI másokkal együttműködve koncepció s terveket dolgoz ki a köpeny és divertor karbantartására.

A lézerplazma témakörben karakterizálták a Szegedi Tudományegyetemen felújított, megnövelt teljesítményű KrF lézer rendszert. Az elérhető intenzitás több mint  $10^{18}$  W/cm<sup>2</sup>. Vákuum ultraibolya spektrométerrel nyomon követték az ionizáció növekedését a lézerintenzitás növekedésével a 10-30 nm spektrális tartományban a plazma-küszöbtől  $10^{16}$  W/cm<sup>2</sup>-ig. Egy új “gyors begyújtási” elrendezést javasoltak a tisztán KrF lézerrel végzett lézeres termonukleáris fúzióra. Megmutatták, hogy az USA-ban tervezett tesztberendezés elektronnyalábbal pumpált erősítője pumpálási idejének 30%-os növelésével ugyanaz a rendszer használható gyors begyújtáshoz is. Egy új, sokfókuszú gyors begyújtási elrendezésben többszáz pikoszekundum hosszúságú impulzust külön-külön fókuszálnak a céltárgy különböző részeire. A prágai PALS lézeren végzett nemzetközi kísérletben röntgen spektroszkópiával kimutatták, hogy a lézerrel szemben terjedő plazma jetek keletkezését valóban a sugárzási hűtés okozza.

A frekvenciamodulált lézerimpulzusok atomokkal való kölcsönhatásának témájában meghatározták a frekvenciamoduláció optimális jellemzőit ahhoz, hogy az atomok minimális sebességszórása mellett a lézerimpulzusok soknívós atomokra kifejtett mechanikai hatása a lehető legnagyobb legyen. Olyan módszereket dolgoztak ki, melyekkel stabilizált frekvenciájú folytonos félvezető lézerek fényéből elektrooptikai amplitúdó- és fázismodulátorokkal optimális tulajdonságú lézerimpulzusok állíthatók elő, és módszereket fejlesztettek ki ezen lézerimpulzusok legfontosabb paramétereinek mérésére. Optikailag sűrű

anyagban a frekvenciamodulált lézerimpulzusok terjedési tulajdonságait összehasonlították a kétnívós atomra kapott eredményekkel. Megmutatták, hogy a lambda formájú átmenettel rendelkező atomban létrehozott adiabatikus folyamathoz kapcsolódóan egy olyan tartományban az anyag áteresztőképessége megnő, és a benne terjedő impulzusok sokkal kevésbé torzulnak el, mint kétnívós rendszerben. Mivel ezen impulzusok nem gerjesztik az atomokat, azok koherenciája megőrződik, s az ilyen rendszerek optikai információ kezelésére és szállítására használhatók.

### *Űrfizika és űrtechnika*

Az intézet kutatói kísérleti és elméleti alapkutatást végeztek az űrfizika területén, valamint fejlesztési tevékenységet fejtettek ki az űrtechnika területén. Űrszondák mérései alapján vizsgálták a naprendszerben található szupratermális és energikus töltött részecskék fluxusát, különös tekintettel a közelgő napfoltminimumra. Megmutatták, hogy a belső helioszférában mért kumulatív részecskefluxusok változékonyságára általuk bevezetett jellemző (az ún. K-paraméter) széles energiasávban lineáris, míg a külső helioszférában a fluxusok változékonysága nem-lineáris függvénye az energia logaritmusának. A helioszféra határtartományainak részecske populációit vizsgálva megmutatták, hogy a Voyager-2 szonda 2007 augusztusában a szuperszonikus napszél határát jelző lökeshullám előtt más részecskeáramlást detektált, mint amit a Voyager-1 2004. decemberi lökeshullám-áthaladása esetén láttak. Összehasonlították az Ulysses és Voyager Űrszondákon a Naptól 2 és 80 Csillagászati Egység (CSE) között, nyugodt naptevékenység idején mért alacsony (2-8 MeV energiájú) protonfluxusokat a Föld környékén mért értékekkel. Az ekliptika közelében radiális változás alig látszik, csak kb. 60 CSE-n kívül kezd jelentőssé válni a külső eredetű populáció, míg a helioszféra pólusai felé haladva a fluxusok erősen csökkennek. (2 kutató, 2 M Ft és 1000 CHF támogatás).

Megkezdtek a Vénusz körül keringő Venus Express Űrszonda ASPERA-4 Iontömeg Analizátora által mért adatok feldolgozását. Ennek során elsősorban a szuper-magnetoszonikus napszél és a Vénusz atmoszférájából eredő részecskék által uralt tartományok közötti átmeneti réteg, a plazmaköpeny sajátosságaira összpontosítottak. Az analízis során elemezték az atmoszféra lehetséges evolúciós folyamatait, valamint a különböző atmoszférikus összetevők ( $O^+$ ,  $He^+$  és  $H^+$ ) szökési mechanizmusait. Meghatározták a szökési ráták egymáshoz viszonyított arányait is. A Pioneer Venus Orbiter korábbi méréseinek elemzése során megállapították, hogy a korábban kialakított kép a legújabb adatok tükrében is helytálló maradt. Plazmaszimulációs modelljükkel leírták a különféle hullámkeltési mechanizmusokat, választ keresve arra, hogy a mikroskálán lezajló események hogyan kapcsolhatók össze a nagyobb léptékű folyamatokkal. (4 kutató, 7,5 M Ft támogatás)

A Cassini Űrszonda plazma műszerei által mért adatok feldolgozása során a Szaturnusz körül keringő Titán hold plazmakönyezetét, a mágneses tér és a plazmaáramlás sajátosságait a 2005. december 26-i (T9) Cassini megközelítés alkalmával a korábbiaktól eltérőnek találták. A plazma műszerek kétszer is észlelték a Titán tömegfeltöltési tartományát, melyek közül az első régióban a Titán plazmakönyéből származó, a 16-19 és a 28-40 amu tömegű, a másodikban pedig a csóvából eredő könnyű részecskéket (1 és 2 amu) detektálták. Az elektron adatok elemzésekor a két tartományban észlelt plazma eredetére vonatkozólag ugyanerre az eredményre jutottak. Feltételezték, hogy a plazmarészecskék szökési folyamataiban döntő szerepet játszik az ionoszféra szupratermális fotoelektronjai által

létrehozott ambipoláris elektromos tér. Ugyancsak a T9 esetében a Titán csóva mágneses szerkezetét vizsgálva kiderült, hogy a csóva igen aszimmetrikus, és a mérés időpontjában a magnetoszférikus plazmaáramlásnak volt egy jelentős komponense a Szaturnusz-Titán irányvonal mentén. Az intézetben fejlesztett egydimenziós hibrid kódot használva megállapították, hogy a módosított kétirányú áramlás instabilitása – elsősorban az 1-10 Hz-es tartományban – jelentős hatással lehet a plazmaköpenyben zajló hullámaktivitásra. (3 kutató, 5 M Ft támogatás)

Az Európai Űrügynökség 2004-ben indította Rosetta űrszondáját a 67P üstököshöz, melyhez a tervek szerint 2014-ben ér oda. A műszerek és az üstökös paramétereinek pontosítása a szonda tízéves missziója során a szoftver folyamatos finomítását igényli ismételt tesztekkel, melyben, és az adatok feldolgozásában az intézet kutatói folyamatosan részt vesznek. A Mars melletti elhaladás során az RMKI meghatározó közreműködésével készült központi számítógép sikeresen irányította az autonóm működést. (5 kutató, 13 M Ft)

### *Biofizika*

EUResist pályázatuk keretében kifejlesztettek egy olyan új adatbányászati eljárást, melyben az adatokat gráfokként reprezentálták, s az adatkiértékelést gráfelméleti, statisztikus módszerekkel végezték el. Megmutatták, hogy a módszer egyaránt használható agykérgi kapcsolathálózatok, mutációk kölcsönhatása, és társadalmi hálózatok esetében is. (4 RMKI-s kutató, 15,8 M Ft RMKI, 10,1 MFt EU FP6)

ICEA pályázatuk keretében elkészítették a hippokampusz és annak térbeli információ feldolgozását lehetővé tevő inputjainak funkcionális modelljét. Megmutatták, hogy ez a neuro-anatómiai és elektro-fiziológiai ismeretekre építő modell szimulált robotokban is képes a hely reprezentálására. Kimutatták, hogy a biológiai alapokra épülő algoritmus rugalmas és hatékony megoldást biztosít mesterséges környezetben is. (3 RMKI-s kutató, 16,3 M Ft RMKI költségvetési és 9,8 M Ft EU FP6 pályázati keret)

A striatum sejt- és kishálózat szintű modellezésével megvizsgálták a substantia nigra pars compacta viselkedését dopamin moduláló hatása alatt. Megmutatták, hogy a dopamin alternálni képes egyes részrendszereket az oszcilláló és a stabil fixpont megoldások között, ami a pathológiás (Alzheimer kór) rendszer lehetséges külső elektromos szabályozására utalhat. (1 RMKI-s kutató, 4,7 M Ft RMKI költségvetési finanszírozással).

A sztochasztikus rezonancia jelenségének korábbi egysejtes vizsgálatát kiterjesztették előrecsatolt neurális hálózatra. A jelenség feltételeire kapott eredményeiket összehasonlították a sejtpopuláció átlagolásával nyerhető jelátvitel esetével. A biológiailag reálisabb modell alapján megállapították, hogy adott zaj mellett optimális csatolási erősség is kell az adott rendszer ideális detektálási képességének kihasználásához. Megállapították, hogy adott körülmények mellett az optimális kapcsolaterősség elsősorban a sejtek abszolút refrakter periódusától, azaz sejt szintű tulajdonságtól függ. (1 RMKI-s kutató, 4,7 M Ft RMKI költségvetési támogatás).

A krónikus szorongás és depresszió patkány modelljére építő számítógépes modelljükkel megmutatták, hogy a zolpidem (egy szelektív GABA-A alfa-1 alegység modulátor) gátolja a szeptális theta ritmust generáló sejtek működését, míg az ún. L-838,417 (szelektív alfa-2

alegység modulátor) nem befolyásolja a mintázat generáló hálózat működését, és ezzel a hippokampusz agyterületen ér el theta aktivitás csökkenést. (1 RMKI-s kutató, 5,5 M Ft RMKI költségvetési keret).

A bombázó proton energia változtatásával tovább csökkentették a PIXE-PAGE módszerük érzékenységét, sikerült ezüsttel megfestett fehérje sávokat is lokalizálni az Ag röntgensugárzásának detektálásával. A modell minták mellett először tudtak plazmamembránból izolált fehérjék sávjaiban vas és cink ionokat kimutatni, de eredményeik egyben rámutattak a mintakészítés hiányosságaira is. Kidolgoztak egy számítógépes adatszűrési módszert a vákuumkamra leszívásakor esetlegesen a mintára kerülő mikroméretű fém szennyezések okozta műtermékek keletkezésének elkerülésére. Az egri vár ásatásából származó üvegkehely PIXE vizsgálatával meghatározták az üvegben és a színezőanyagban levő nyomelemeket, és ennek alapján azonosították a bányát, ahonnan a színezőanyagként használt kobaltérc származik. (3 kutató, 18 M Ft RMKI, 1 M Ft NAÜ forrás).

#### *Informatika, e-tudomány (e-science)*

Az informatikai fejlesztések során az RMKI SZHK munkatársai végrehajtották az MTA KFKI telephelyi intézetek számára szolgáltatást nyújtó központi szerverpark felújítását. Az új generációs szerverekre való folyamatos áttérés a telephelyi tudományos munka lehető legkisebb megzavarása és folyamatos kiszolgálása mellett ment végbe.

A GVOP – 2004 – 3.1.1 Campus6 pályázata keretében megvalósították a központi szerverpark és szolgáltatásai IPv6 fölötti elérhetőségét, a levelezés (SMTP) kivételével. Az EduRoam projekthez csatlakozva kutatóik a projektben résztvevő vendég-intézeteknél hálózati hozzáféréshez jutnak helyi regisztráció nélkül.

Az RMKI Grid, mint regionális LCG (LHC Computing Grid) központ működtetése, bővítése és fejlesztése az RMKI más főosztályaival együttműködve, az EGEE II projekt keretében folyamatos volt. A regionális központ (BUDAPEST Grid site) a beszámolási időszakban 42 quad-processzorral és 36 TB tárolókapacitással bővült. A Marie Curie program keretében elkészült a WMS-X (Workload Management System eXtension) program, amely a gLite rendszer funkcionalitását bővíti tömeges Grid job-ok és fájlok kezeléséhez. Az RMKI munkatársai CA szolgáltatást nyújtottak az LCG és a HunGrid magyar kutatói számára, az év folyamán átlépték a 100. tanúsítvány kiadását.

Folytatódott a MOBil SegítőTárs fejlesztése a GVOP – 2004 – 3.1.1 MOST2 pályázata keretében, melyben a Veszprémi Egyetem, mint konzorcium koordinátor vezetésével az RMKI SzHK Beszéd- és Rehabilitáció-technológiai Osztály vett részt. A 2007-ben zárult projekt során GPRS kapcsolatra épülő programok tervezése, írása és tesztelése történt, 40 új felhasználót tanítottak be a rendszer használatára.

Befejeződött a nemzetközi Braille kottatár létrehozása az eBrass (electronic Braille Services) EU-s program keretén belül, olasz, spanyol és holland partnerekkel együttműködve. A Braille kottatár fejlesztésében az RMKI SzHK Beszéd- és Rehabilitáció-technológiai Osztály a Braille kották minősítését, az üzleti terv kidolgozását és az információ-terjesztést végezte.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az RMKI számos MTA kutatóintézettel tart fenn napi szakmai kapcsolatot, a legszorosabbakat a KFKI telephelyi intézetekkel. Tagja az SZFKI, AEKI, MFA és RMKI alkotta KFKI Condensed Matter Research Center-nek és a Budapesti Neutron Központnak (BNC). Hagyományosan erős az együttműködése az ATOMKI-val, különösen a részecskefizikában, a magfizikai módszerekkel végzett anyagtudományi, és a fúziós kutatásban. Fontosak munkakapcsolatai a KK, a SZTAKI, a Konkoly Thege Miklós Csillagászati KI és az SZBK kutatóival is.

Az RMKI továbbra is nagy fontosságot tulajdonít az egyetemekhez fűződő szoros kapcsolatoknak. Ebben az évben is 30 munkatársa tartott kötelező és speciális előadásokat, vezetett gyakorlatokat az ELTE, a BME, a Pécsi Tudományegyetem, a Szegedi Tudományegyetem, a Debreceni Egyetem és a Szent István Egyetem tanszékein. A felsorolt egyetemekkel érdemi kutatási együttműködés is folyt. Munkatársaik részt vettek az „Ionnyaláb-, foton- és hiperfinom módszerek nanoszerkezetű anyagok vizsgálatában” című, az ELTE Fizika Doktori Iskolájában is akkreditált ERASMUS iskola szervezésében (2007. május, Zakopane, Lengyelország). Az RMKI rendszeresen fogadja az ELTE fizikus és biofizikus hallgatóit a tanrendben előírt emelt szintű laboratóriumi gyakorlatok végzésére, témákat és témavezetést biztosít tudományos diákköri dolgozatok és egyetemi szakdolgozatok készítéséhez. Jelenleg 10 PhD-értekezés készül RMKI-s témavezető irányításával, több eredményes PhD védés volt. Az RMKI együttműködési megállapodást írt alá az ELTE, a BME és a Szegedi Tudományegyetem érdekelt Doktori Iskoláival, így számos vezető kutatója tőrzstagja és oktatója ezeknek az iskoláknak.

Az RMKI-ban szinte valamennyi kutatás nemzetközi keretekben folyik, a legfontosabb szálak a CERN-hez, az ESA-hoz és az EURATOM-hoz kapcsolódnak. Eredményes az együttműködés számos nemzetközi és nemzeti intézménnyel. Egyre nagyobb szerepet kapnak a külföldi, elsősorban európai nagyberendezések (szinkrotronok, iongyorsítók, neutronforrások, tokamakok, sztellátorok) mellett végzett mérések is. Az együttműködő partnerek felsorolása e beszámoló kereteit meghaladja, az RMKI kutatói pl. úrfizikában mintegy 35, anyagtudományi kutatásokban 30 külföldi intézettel folytatnak közös kutatásokat, részecskefizikában százat is meghaladó intézetről van szó.

A részecskefizikusok és nagyenergiás magfizikusok a CERN-nél végzett mérések adatainak feldolgozásában és az új LHC részecskegyorsító CMS, ALICE és TOTEM kísérleteinek felépítésében és új SPS kísérletek előkészítésében is részt vesznek. Fontos kiemelni azt is, hogy az RMKI kutatói a CERN-ben nemcsak a „mamut”- kísérletekben vesznek részt, hanem kisebb mérésekben is kezdeményező szerepet játszanak, így pl. a NA61/SHINE kísérlet révén a nemzetközileg is magasan értékelt elméleti nehézion-fizikai kutatások – többek közt a kvark-anyag fázisátalakulása kritikus pontjának a keresése – hazai vezetésű kísérleti kutatásokkal is kiegészülnek.

Az RMKI koordinálja az RMKI, az ELTE és a Debreceni Egyetem részvételével a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium (USA) Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjénél (RHIC) működő PHENIX-MAGYARORSZÁG kísérleti együttműködést.

Az RMKI a koordinátor a magyar EURATOM fúziós programban, ebben számos magyar intézmény (KFKI AEKI, Széchenyi Egyetem, ATOMKI, BME, ELTE, Dunaújvárosi Főiskola) az RMKI közvetítésével vesz részt. E szerepből adódóan kutatói számos nemzetközi bizottságban tevékenykednek. Az európai közös tokamakokon (JET) végzett munkában a lítium nyaláb diagnosztika felelőse a magyar csoport, melynek kutatói bekapcsolódtak a világ leendő első fúziós reaktora, az ITER tervezési munkáiba is. A tokamak plazma-kutatások mellett az EURATOM a lézerplazmás fúziós kutatásokat is támogatja. A mágnésesen összetartott plazmák kutatása a European Fusion Development Agreement (EFDA) égisze alatt szintén nemzetközi együttműködésben folyt, ennek során az RMKI kutatói mintegy 10 különböző európai berendezésen folytatnak kutatásokat.

Az RMKI működteti a Cluster Magyar Adatközpontot, amely pálya- és egyéb kiegészítő adatokat szolgáltat az ESA (Európai Űrügynökség) négy azonos műszerezettségű Cluster holdjának tudományos adatrendszerébe. A biofizika (számítógépes agytudomány) területén eredményes nemzetközi pályázatok alapján aktív, professzor- és hallgatócserét is magában foglaló együttműködés folyik a Kalamazoo College (Michigan University, USA) kutatóival. A CERN EGEE (Enabling Grids for E-science) projektjében valamennyi földrész 260 intézménye vesz részt és szoros az együttműködésük a Magyar Grid Kompetencia Központ többi intézetével (BME, ELTE, NIIFI, SZTAKI), az EGEE magyar részvételét az RMKI koordinálja.

Munkatársaik tisztségviselői vagy tagjai különféle akadémiai testületeknek, az Eötvös Loránd Fizikai Társulatnak és aktívan részt vesznek a nemzetközi tudományos közéletben is. Több munkatársuk nemzetközi tudományos szervezetekben tag, illetve tisztségviselő. Legfontosabbak ezek közül a CERN Tanácsa és bizottságai, EURATOM Scientific and Technical Committee, EFDA Science and Technology Advisory Committee (vice-chair), Joint Underating for ITER Governing Board, EFDA Steering Committee, az Európai Fizikai Társulat (EPS), International Astronautical Academy (Board of Trustees, International Space Science Committee), COST Domain Committee for Materials, Physical and Nanosciences, COST Action Management Committees, a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA) szakértői bizottságai, European Neural Network Society Executive Committee, EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication). Több nemzetközi szervezetben (COSPAR, European Science Forum on Research Infrastructures) nemzeti képviselői tiszteket töltenek be, így többek között az Európai Bizottság mellett működő FP7 Research Infrastructures programbizottságban, az Európai Unió kormányai által létrehozott kutatási nagyberendezés-stratégiai bizottságban, európai nagyberendezések irányító bizottságaiban, stb. Az RMKI kutatói tagjai, tisztségviselői az MTA szakmai testületeinek, a MAB Fizikai tudományok tudományági bizottságának, a Bolyai Kuratórium szakmai bizottságának, a hazai űrkutatás irányító testületeinek (Magyar Űrkutatási Tanács, Űrkutatási Tudományos Tanács), a MTESZ tudományos egyesületeinek (ELFT és MANT), az SzHK munkatársai tagjai az NIIF bizottságainak, illetve a Linux kernel netfilter/iptables komponensének fejlesztését végző nemzetközi munkacsoportnak.

Ugyancsak többen tagjai nemzetközi folyóiratok szerkesztő- vagy tanácsadó bizottságának, nemzetközi konferenciák tanácsadó vagy programbizottságának, külföldi kutatóintézetek tudományos tanácsának és referensi bizottságainak, illetve referensek nemzetközi folyóiratok felkérésére.



#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A KFKI RMKI eredményesen szerepelt az OTKA- és NKTH pályázatokban, valamint a most induló FP7 projektekben is több beadott pályázat készült.

Igen sikeresen zárult a „DYNASYNC” FP6-os három éves STREP projekt, melynek keretében az RMKI 188 kEUR támogatást kapott. Fő célja a grenoble-i European Synchrotron Radiation Facility nukleáris rezonanciaszórás nyalábjának metodikai fejlesztése és dinamikai, ill. vékonyréteg-mágnességi kutatások végzése volt, ebben munkatársaik detektor- és szoftverfejlesztéssel, valamint mágneses vékonyrétegek csatolási, anizotrópia- és doménszerkezeti tulajdonságainak vizsgálatával vettek részt.

Rendkívül sikeresnek nevezhetjük Grid-pályázataikat is 2007-ben: volt egy féléves MCA-látogató, részt vettek az EGEE-2 projektben és elnyertek 2 infrastruktúra-fejlesztést elnöki keretből, 17,7 M Ft értékben. Az utóbbival a BUDAPEST grid-állomás kapacitását 300 CPU-ra és 40 TB-ra bővítették; 100 CPU-t a nem-nagyenergiás magyar kutatók HunGrid virtuális szervezetének dedikáltak. A Marie Curie-pályázatok kapcsán azonban szembesültek azzal a nehézséggel, hogy nehéz külföldi vendégkutatókat alkalmazni, mert Magyarország a jövedelem normalizálására alkalmazott „country factor”-listán alul van értékelve, pl.: EU-átlag: 1,0; CZ: 0,92; PL: 0,88; H: 0,69; SK: 0,68. Ezen probléma orvoslása csak magasabb szinten történhet, de feltétlenül szükséges.

EURATOM támogatás (mintegy 221 M Ft): A mágnesesen összetartott plazmák, lézerplazmák kutatására és fúziós technológiai fejlesztésekre a kimutatott költségek legalább 20%-át és az utazások költségeinek 100%-át fizette.

NKTH NAP Pályázat (mintegy 200 M Ft) keretében a PFFO intelligens videó diagnosztika fúziós berendezéshez, atomnyaláb diagnosztika fejlesztése fúziós berendezésekhez és fúziós erőművek elemeinek tervezése témakörökben végzett támogatott tevékenységet.

Az űrfizika-űrtechnika területén a Rosetta, a Cluster, a Venus Express és a Bepi Colombo űrprogramokkal kapcsolatban a kutatócsoportnak 2007-ben öt szerződése volt az ESA PECS (Program for European Cooperating States) hivatalával. Az RMKI aktív résztvevője az FP6 keretprogram támogatásával létrehozott Europlanet konzorciumnak, amely szervezi és koordinálja az Európában folyó bolygókat. Az International Space Science Institute (Bern) pályázatán az RMKI vezetésével létrehozott nemzetközi kutatócsoport nyert támogatást. A téma területén eredményes hazai pályázatokon is, 2007-ben egy OTKA és három KVM-Magyar Űrkutatási Iroda szerződésük volt.

A biofizika területén az RMKI kutatói részt vesznek az ICEA: Integrating Cognition Emotion and Autonomy, IST-4-027819-IP című EU-s pályázatban, melynek célja valós körülmények között, a valódi élőlények rugalmasságával és alkalmazkodó képességével az "életben maradáshoz" szükséges feladatokat megoldani képes önálló robot létrehozása. A 2007-ben tartott értékelő ülésen munkájukat kiemelkedőnek minősítették.

A NAÜ a Nukleáris Bioanalitikai Csoport „Micro-PIXE analysis of metallo-proteins” című, IAEA Co-ordinated Research Project pályázatának második évi eredményeit elfogadta és a szerződést még egy évre meghosszabbította, további 4000 EUR támogatást nyújtva.

A Campus6 (GVOP – 2004 – 3.1.1) projekt keretében folytatódott és szélesedett a telephelyi számítógép-hálózati infrastruktúra és szolgáltatások IPv6 támogatása. Az új hálózati protokoll megismerésével és használatba vételével az RMKI élen járt a hazai akadémiai és egyetemi intézmények között.

Lezárult a MOST2 (GVOP – 2004 – 3.1.1) projekt, amelynek keretében vak emberek számára fejlesztettek egy olyan hordozható, és egyszerűen használható segédeszközt, amely lehetővé teszi, hogy a napi feladataikat (szövegszerkesztés, könyvolvasás, elektronikus levelezés, web böngészés, stb.) elvégezhessék. A fejlesztésben az RMKI SzHK Beszéd- és Rehabilitáció-technológiai Osztály konzorciumi tagként részesül támogatásban, s az eddigi eredmények alapján remény van arra, hogy piaci végtermék kidolgozásához innovációs támogatást nyerjen el.

Az MTA kétoldalú egyezményes és TÉT megállapodásai kiegészítő mobilitási támogatást jelentettek. Az Európai Unió sok száz fős multilaterális programjai mellett nagy szükség van a néhány főt érintő kétoldalú együttműködésekre, további fenntartásuk fontos érdek. Az RMKI kutatóinak eredményes kapcsolatai a világ számos országára kiterjednek.

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

1. Mekjian AZ, Csörgő T, Hegyi S: A Bose-Einstein model of particle multiplicity distributions. Nuclear Physics A784: 515–535 (2007)
2. Alt C, Barna D, Fodor Z, Hegyi S, László A, Lévai P, Pálla G, Siklér F, Szentpéteri I, Sziklai J, Vesztergombi G, Zimányi J, (NA49 Collaboration): New results and Perspectives on R<sub>AA</sub> measurements Below 20 GeV CM-energy at Fixed Target Machines. International Journal of Modern Physics E 16: 2516. (2007)
3. Barnaföldi GG, Lévai P, Lukács B: Searching extra dimension in compact stars, Astronomische Nachrichten 328: 808 (2007)
4. Diósi L: A Short Course in Quantum Information Theory – An Approach From Theoretical Physics. Springer, Berlin. 2007.
5. Lin J-F, Vankó G, Jacobsen SD, Iota V, Struzhkin VV, Prakapenka VB, Kuznetsov A, Yoo C-S: Spin Transition Zone in Earth's Lower Mantle. Science, 317: 1740–1743 (2007)
6. Dézi I, Fetzer Cs: In situ study of electrodeposited thin layers by Mössbauer spectroscopy, Electrochemistry Communications 9: 1846–1849 (2007)
7. Deák L, Bottyán L, Nagy DL, Spiering H, Khaidukov YuN, Yoda Y: Perturbative theory of grazing-incidence diffuse nuclear resonant scattering of synchrotron radiation. Physical Review B 76: 224420 (2007)
8. Rácz I: Stationary black holes as holographs, Classical and Quantum Gravity 24: 5541–5571 (2007)
9. Bradley, M, Eriksson, D, Fodor Gy, Rácz I: Slowly rotating fluid balls of Petrov type D Physical Review D75 024013 (2007)

10. Balog J, Weisz P: Construction and clustering properties of the 2-d non-linear sigma-model form factors: O(3), O(4), large n examples, Nuclear Physics B 778: 259–309 (2007)
11. Adare A., Csörgő T, Ster A et al., PHENIX Collaboration: Energy Loss and Flow of Heavy Quarks in Au+Au Collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 200$  GeV, Physical Review Letters 98 172301 (2007)
12. Schumann, M, ..., Glück F et al, KATRIN Collaboration: Measurement of the neutrino asymmetry parameter B in neutron decay, Physical Review Letters 99 191803 (2007)
13. Bakos JS, Djotyan, GP, Ignác PN, Kedves MA, Serényi M, Sörlei Zs, Szigeti J, Tóth Z: Acceleration of Cold Rb Atoms by Frequency Modulated Light Pulses, European Physical Journal D 44 (1): 141–149 (2007)
14. Demeter G, Dzsotjan D, Djotyan GP: Propagation of Frequency-chirped Laser Pulses in a Medium of Atoms with a Lambda-level Scheme, Physical Review A 76 (2), Art. No. 023827 (2007)
15. Kocsis G, Kálvin S, Lang PT, Maraschek M, Neuhauser J, Schneider W, Szepesi T, ASDEX Upgrade Team: Spatio-temporal Investigations on the Triggering of Pellet Induced ELMs, Nuclear Fusion 47: 1166–1175 (2007)
16. Barabash, S. et al. (50 coauthors, incl. Szegő K): The loss of ions from Venus through the plasma wake, Nature 450: 650–653 (2007)
17. Szegő, K, Bebesi Z, Bertucci C, Coates AJ, Crary F, Erdős G, Hartle R, Sittler EC, Young DT: Charged particle environment of Titan during the T9 flyby, Geophysical Research Letters, Volume 34, Issue 24, CiteID L24S03 (2007)
18. Juhász A, Horányi M, Morfill GE: Signatures of Enceladus in Saturn's E ring, Geophys. Res. Lett.. 34, L09104, doi: 10.1029/2006GL029120 (2007)
19. Érdi P: Complexity explained. Springer, Berlin (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	220	Ebből kutató <sup>2</sup> :	138
PhD, kandidátus:	84	MTA doktora:	30
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			52
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			295
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			192
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	164
nemzetközi együttműködés keretében:	168	SCI által regisztrált folyóiratban:	166
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	443,79	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	2667
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2398
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	1	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	1
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	7	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	150	posztterek száma:	58
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	24	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	13
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			28
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	18	Doktori iskolát vezetőik száma:	3
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	28	Gyakorlati kurzusok száma:	8
TDK munkát készítő hallgatók száma:	15	Diplomamunkát:	16
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	30
			255
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			998 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	12	Teljes saját bevétel:	590 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			23
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	60 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			6
NKFP:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	159,4 MFt
Egyéb:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	27,5 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			22
EU forrásból:	15	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	225,1 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	51,2 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29–33., 1525 Budapest, Pf. 49.

Telefon: 392–2225, Fax: 392–2226

e-mail: barsony@mfa.kfki.hu, honlap: www.mfa.kfki.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

2007. az intézet jogelődjének, a Műszaki Fizikai Kutató Intézet megalakulásának ötvenedik és az intézetegyesítés tizedik évfordulója miatt kiemelt fontosságú jubileumi év volt, amit intenzíven használtak ki a kutatómunka megismertetésére. Kihelyezett ülést tartott az MFA-ban az MTA Fizikai valamint Műszaki Tudományok Osztálya, látogatást tett az MTA elnöke és az NKTH elnökhelyettese. 2007. október 4-én ünnepi ülést tartottak nemzetközi meghívottakkal az MTA Székházban, állandó kiállítást szerveztek és az OMIKK-kal közösen egy DVD-t adtak ki szponzori támogatással az intézet történetéről. A Fizikai Szemle és a Híradástechnika folyóiratok külön számot szenteltek az intézet eredményeinek.

Az új igazgatói pályázatban megfogalmazott szervezeti változások nem befolyásolták a tavalyi év munkáját, az intézet 2007-ben még változatlanul a négy főosztályos szervezeti struktúrában működött. Ez a beszámoló is ennek megfelelő struktúrában készült.

A főosztályi szerkezet sokat segített az intézet profiljának kialakításában, a kutatási főirányok stabilizálásában. Fejlődött a döntés-előkészítés az *Igazgató Tanácsban*, bár négy év után megállapítható, hogy túlzottnak bizonyult az igazgató eredeti szándéka szerint a *főosztályvezetők* szerepével kapcsolatos, az általuk vezetett részlegek szakmai munkájának önálló, kezdeményező, koncepcionális szervezésére és irányítására vonatkozó elvárás. A főosztályok egy részében nem sikerült a programok összehangolása, a csoportok témaválasztása részben megmerevedett, sőt két téma – az utánpótlás hiánya, a nem kellő integráció következtében – kritikus helyzetbe került. A nyolc tagú *Tudományos Tanács* az elmúlt évben is jól örködött a kutatómunka szakmai színvonala és az intézetben folyó posztgraduális képzés körülményeinek, a témavezetés színvonalának javítása felett. Az öttagú *Intézeti Tanács* külső szakértőinek véleménye szintén hozzájárult az igazgatói döntések megalapozásához, bár az MTA vezetés nemzetközi tanácsadó testületek bevezetésére vonatkozó elképzelései miatt további működési keretei bizonytalanok. 2007-ben is folytatták a rendszeres intézeti tudományos szemináriumokat, a doktoranduszok félévenkénti beszámoltatását és az MFA-ban öt éve működő ISO minőségbiztosítási rendszer szerinti éves kutatói számonkérést, témaértékelést. Az eredmények megismertetése folyamatos, kiemelt feladat volt, megjelentették a hagyományos *angol nyelvű MFA évkönyvet*.

Az Intézetben négy éve sikeresen alkalmazott belső szabályozást követve sikeresen *folytatták a fiatalítást*. Érzékeny veszteségük egy tudományos főmunkatárs, osztályvezető kiválása, és három tudományos munkatárs kilépése – anyagi okokból. Egy újabb emeritus professzorral gyarapodott idősebb kollégáik sora, és az intézetnek megítélt két FIKU-álláshely mellett saját forrásaik terhére négy új tudományos segédmunkatársat (PhD-hallgató), egy új PhD-ösztöndíjast, két posztdoktort, négy fiatal mérnököt, egy-egy technikus és adminisztratív kollégát vettek fel. *Továbbra is elmondható, hogy az elfogadott, kiszámítható szabályzás fokozta a stabilitást és megalapozta a továbblépést az intézeti foglalkoztatás-politikában.*

Csökkenő alapellátás mellett a *pályázási kényszer* 2007-ben is fokozódott. Különösen a tavaly indult FP7 pályázatokra való tekintettel a nemzetközi és hazai pályázati rendszerben való sikeres szereplést az igazgató irányítása alá rendelt *pályázati menedzser* támogatja.

*Felújítási és beruházási keret* hiányában 2007-ben is saját erőből folytatták a laborok korszerűsítését, amit a *terület-racionalizálási kényszer* is nyomatékossított 2007-ben. Két külön épületben működő osztály (Vékonyréteg nanoszerkezetek és Biomérnökség) elköltöztetésével, ill. év végi átszervezésével *>400m<sup>2</sup>-rel csökkentették az MFA-t terhelő költségeket*. Ehhez a vékonyréteg labort (18/C épület), az ellipszo, mágneses, és képfeldolgozási labort, nyolc dolgozószobát, valamint a főépület fogadótereit újították fel. A működési költségcsökkentés jegyében az MTA Elnöki Keretből elnyert támogatással zártkörű technológiai hűtőrendszert (29A, B, 18/C) építettek ki.

Az intézményes *nemzetközi tudományos kapcsolatok* terén 2007. június 14-én Berlinben az MTA MFA tagja lett a World Materials Research Institute Forum szervezetének, melyet a japán National Institute for Materials Science (NIMS) igazgatója, Kishi professzor kezdeményezett és vezet. A NIMS-szel való együttműködésük eredményeként kétéves kutatómunka után hazatért az első posztdoktoruk Tsukubából. Folytatták a tajvani Industrial Technology Research Institute-tal kialakított együttműködést közös FP7 pályázatokkal.

A 2005-ben létrehozott első MFA „spin-off” vállalkozás, az *ANTE Innovatív Technológiák Kft.* 2007-ben Székesfehérvárra települt. Átvette az MFA kerámia-gyártási feladatait, és több sikeres megbízás mellett 67 MFt-nyi pályázati támogatást nyert egy Jedlik Pályázat alvállalkozójaként. Az év elején megalakult az MFA második spin-off vállalkozása, a *Tactologic Kft.* (tulajdonosok: MFA- PPKE-Richter Gedeon Rt.), és sikeresen fejlesztette ki az MFA integrált tapintásérzékelőjére épült fejlesztő-rendszerét. Az MTA által Székesfehérváron alapított AlbaNano Kft. egyik háttérintézményeként az MFA is aktív szerepet vállal a régió iparának támogatásában.

*Ipari kapcsolataik* sikeresen bővültek 2007-ben. Folyik a Weszta-T Kft. innovatív gázjelző készülékének a gyártása (megbízhatósági tesztje) az MFA integrált pellisztor-chipjének felhasználásával. A cég megkezdi a 2007-ben az AQUANAL projektben közösen kifejlesztett olajszenyvezés-jelző műszerük gyártásba vitelét. K+F együttműködési keretszerződést írtak alá 2007. októberében a Tateyama Kagaku, Toyama, japán cég elnökével.

2007-ben zömében kifutottak, sikerrel teljesültek az MFA NKTH-s és FP6-os projektjei is. Mivel az innovációs alapot a kormányzat 2007-ben már nem töltötte fel, új NKTH pályázatok kiírására alig került sor, ami a következő években az MFA-nak is fokozott finanszírozási gondokat okoz. *Nagyon besűküült az intézet mozgástere*, amit növel a bizonytalanság a vagyongazdálkodási, az államháztartási, az akadémiai törvényekben és szabályzásban várható változások következtében. *Ilyen körülmények között sikerként könyvelhetik el, hogy a tudományos és adminisztratív munkatársak jól koordinált, megfeszített erőfeszítésével az Intézet eredményessége 2006-hoz képest csak 15–18%-kal csökkent és 2007-es gazdasági évét 1,38 Mrd Ft-os költségvetéssel zárta.*

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

2007-ben a *négy fő kutatási irányt (vékonyrétegek, nanotechnológia, fotonika és mikrotechnológia) reprezentáló főosztályokon belül* a kutatás 12 osztályvezető irányításával önálló témagazdálkodású kutatócsoport ill. laboratórium kereteiben folyt.

### *Mikrotechnológiai Főosztály*

A főosztály feladata változatlanul a mikro- és nanorendszerek integrációja; szilícium és vegyületfélvezető alapú struktúrák, érzékelők, fényemittáló és -detektáló eszközök kutatása, preparációja és vizsgálata ionsugaras technikákkal és elektromos mérési módszerekkel.

Mikrotechnológiai Osztály (24fő): Új Si tömbi mikromechanikai eljárások kutatása folyik, melyekkel Si kémiai és elektrokémiai marásával a felületre merőleges oldalfalú alakzatok és zárt membránok állíthatók elő, pozícionált proton mikronyalábbal történő lokális Si roncsolással és szelektív pórusos Si marással. Az eljárás működését mikrofluidikai rendszerekben használható visszacsapó szelepek és turbinák létrehozásával demonstrálták.

Különböző molekulásúlyú enantiomerek szeparálására atmoszférikus nyomás feletti új ultraszűrési módszerhez alkalmas módon rögzített nanostruktúrált membránt fejlesztettek (pórusos szilícium: 35% porozitás, 5nm pórus átmérő).

Elkezdtek mozgó, illetve vezérelhető aktuátor MEMS eszközök kutatását. Végeselem (FEM) szimulációk alapján megtervezték és tesztstruktúrákon ellenőrizték a különböző mozgatási elveket (elektrosztatikus, mágneses, termikus) valamint a beavatkozók tulajdonságait (deformáció, mozgatási sebesség, maradó feszültségek).

Folytatták a kizárólag gyémántból felépülő, szabadon álló mikrofűtőtestek technológiájának kutatását áramlásmérő szerkezetek céljára. Az ultrananokristályos gyémánt réteg leválasztása pontos struktúrakialakítást tesz lehetővé a SAD (Selectiv Area Deposition) technikával.

Az erdők CH<sub>4</sub> forgalmának mérésére *fotoakusztikus* elven működő ppm érzékenységgű *gázérzékelők* fejlesztése folyik. A lézermimpulzus által keltett akusztikus hullám mérésére az MFA fejleszti az integrált mikrofont. A méretezés és a specifikációknak megfelelő geometriájú szerkezetek előállítására kétoldalas, tömbi szilícium mikromechanikai megmunkálással kritikus, precíz elektrokémiai marásmegállítást igényel. Kidolgozták a 4-6µm-es membrán laterális strukturálását reaktív ionmarással, a lúgos marószerkek ellenálló ProTEK polimer használatával. A membrán elmozdulását optikai kiolvasással detektálják.

A légközlekedés repülőtéri forgalmának monitorozó rendszerét fejlesztik. A totál-reflexiós fluoreszcens röntgen vizsgálathoz a MEMS laborban készített referencia-chipen jól definiált anyagmennyiségű, mikroméretű Cr alakzatokat (egy-egy chip szimmetriatengelye mentén 2250 elem, összes tömege 2,2905 ng) hoztak létre fotolitográfia, vákuumpárologtatás és „lift-off” eljárás alkalmazásával.

Sikeresen folytatták az ITER neutronfluxusát kibíró plazmasugárzás-mérő *bolométer* fejlesztését, elsősorban a vékony SiN<sub>x</sub> membrán hátoldalán a 4-10µm vastag W abszorber-kialakítás optimalizálásával, előoldalán ±1,5%-os szórású Pt ellenállás hőmérőkkel.

Új, perspektívikus témájuk a nehésvízzel kezelt, *deutériummal passzívált Si felületek* stabilitásvizsgálata. A hagyományosan hidrogénnel passzívált Si felülethez viszonyítva a deutérium csak magasabb hőmérsékleten és lassabban deszorbeálódik. Ez egyrészt fékezi a natív-oxid kialakulását, másrészt segíti a határfelületi állapotsűrűség csökkentését.

A meghajtó áramkörrel *integrált 2x2-es tapintásérzékelő mátrixot* fejlesztettek ki szabadalmaztatott CMOS-kompatibilis tömbi Si-mikrogépészeti technológiájukkal. Folyik a 8x8-as érzékelő-tömb fejlesztése. A megrendelő spin-off cégük az orvosi alkalmazások fejlesztésében érdekelt, amihez megoldották a tapintásérzékelő tokozását.

A piacra vitel alapvető feltételeként folytatták az MFA *katalitikus mikropellisztor* típusú *gázérzékelők* terheléses vizsgálatát. A tartós funkcionális tesztek alatt az érzékenység

szénhidrogénekre csökken, majd az eszköz „megvakul”. Kiterjedt kísérletsorozatokkal, analitikai és mikroszkópos tesztekkel megállapították, hogy a repedés-mentes mikrofüttőttest akár 40mW-tal is megbízhatóan fűthető, de a lokális túlmelegedés termomechanikai törést okoz. A gyártás automatizálása és a működés biztonsága érdekében új pórusos  $\text{Al}_2\text{O}_3$  réteggészítési eljárással (Al reaktív porlasztásával) közvetlenül a fűttőttesteken alakítják ki a hordozóréteget, amire automatikus adagolással cseppentik a Pt szemcsék létrehozásához a hexaklór-platinasavat.

Megrendelésre 2007-ben is folyt a felületi hullámszűrők (SAW) gyártása.

Félvezető Karakterizáció Osztály (9 fő): Hagyományos kutatási területe az osztálynak az *implantált szerkezetek ionsugaras vizsgálata*.

SiC-ban elsősorban ferromágneses félvezetők előállításához vizsgálták nagy dózisu  $\text{Ni}^+$  és  $\text{Cr}_2^+$  implantáció hatását.

SiC-ban nagy dózisu  $\text{Ar}^+$  és  $\text{P}^+$  implantáció magas hőmérsékletű aktiválásának mechanizmusát kutatták Nd:YAG impulzuslézerral ( $\lambda = 532 \text{ nm}$  és  $\lambda = 355 \text{ nm}$ ). Előoldali hőkezelésnél felületi oxigén beépülés, és a kristályos/amorf (c/a) réteghatáron induló visszakristályosodás, míg a hátoldali hőkezelésnél a c/a réteghatáron a kristályhibák diffúziója és feszültség-képződés figyelhető meg. A lézerpulzus energiasűrűségét növelve itt is elkezdődik a felületi oxidáció.

*Ge nanokristályokat* tartalmazó új Si/SiO<sub>2</sub>/nc-Ge/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> és Si/SiO<sub>2</sub>/nc-Ge/SiO<sub>2</sub> szerkezeteket preparáltak (elektronsugaras Ge párologtatással 350°C-on, HNO<sub>3</sub>-ban vagy H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>+H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-ban növesztett vékonyoxiddal és CVD nitriddel). Vizsgálták a Ge nanokristályok leválasztási idejének hatását a Si/SiO<sub>2</sub>/nc-Ge/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> szerkezetek memóriatulajdonságaira memóriaablak és retenció mérésekkel. 100 msec,  $\pm 25 \text{ V}$  impulzusokkal az 1 évre extrapolált memóriaablak szélesség 0,3 V lett.

A *Si nanokristályokat* tartalmazó többrétegű Si/SiO<sub>2</sub>/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/nc-Si/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> valamint Si/SiO<sub>2</sub>/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/nc-Si/SiO<sub>2</sub>/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> mintasorozatokon jó töltésinjekciós tulajdonságokat mértek. 10 ms,  $\pm 12 \text{ V}$  impulzusokkal az 1 évre extrapolált memóriaablak 0,3 V.

Nemzetközi együttműködésben (University of Minho, Portugália) vizsgálták porlasztással készített MIS szerkezetek optikai, elektromos és memóriatulajdonságait, melyek SiO<sub>x</sub>-ben vagy Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ban CdSe nanokristályokat tartalmaztak. Egyes minták esetében jó töltésbeviteli tulajdonságokat találtak.

Az *NKFP CIGS napelem-projekt* részeként Si/SiO<sub>x</sub>, valamint ZnO rétegek vizsgálata történt galvanomágneses méréssel.

A SiO<sub>2</sub>/Si határfelületre CO atmoszférában nagy hőmérsékleten növesztett *epitaxiás 3C SiC nanokristályok* alkalmasságát vizsgálták növekedési magokként epitaxiális SiC rétegnövesztésekhez. Igazolták, hogy SiC nanokristályokkal nagy borítottságú Si hordozóra üregmentesen lehet polikristályos köbös SiC réteget növesztetni CVD módszerrel. XRD, TEM, RBS/C ill. SIMS/SNMS vizsgálatokkal folyik az epitaxiális 3C SiC rétegnövesztés paramétereinek optimalizálása mikromechanikai felhasználásra.

Optoelektronikai Osztály (16 fő): Feladataik a napelemtechnológia-kutatások, a fényemittáló vegyületfélvezető szerkezetek kutatásán kívül a szenzorok zajának vizsgálatára és mikrohullámú mérés-technikai alkalmazásokra is kiterjednek.

A 2007-ben zárult projekt keretében megépítették és beüzemelték a rendszer három modulját (zsilip, lézervágó, párologtató), és teszt-kísérleteket végeztek a párologtató forrásokkal.



Ha a CIGS napelemekben a CIGS és ZnO réteg közé CdS réteget illesztenek, a CdS réteg pufferelem a két anyag közötti rácsállandó különbséget és jelentősen nő a napelem hatásfoka.

A már két éve üzemelő reaktív porlasztó modullal reprodukálható módon sikerült szobahőmérsékleten átlátszó vezető ZnO kontaktusréteget előállítaniuk. Ellipszometria segítségével meghatározták az Al-mal adalékolt Zn target rétegleválasztás előtti előkészítésének szükséges paramétereit, és a ZnO reaktív porlasztás *in-situ* szabályozásának peremfeltételeit. Erre a célra a szabadalmaztatott („Pinholekamerát alkalmazó leképző optikai vizsgáló berendezés”) inkohérens spektroszkópiás ellipszometriás módszerüket adaptálták. A képképző berendezés legalább 3 különböző hullámhosszon, viszonylag nagy felületen egyszerre méri a rétegvastagságot és a törésmutatót (azaz a rétegösszetételt). Kvalitatív magyarázatot adtak a reaktív porlasztás során fellépő, a reaktív plazma nyomásának és feszültségének spontán, stabil és reprodukálható oszcillációjára, amit jól hasznosítanak a reprodukálható leválasztás munkapont-beállítása során.

Plazmaimmerziós ionimplantációval (PIII) sekély emitteres, szitanyomtatott kristályos *Si beltéri napelemeknél* sikerült a paszta-kontaktus beégetési profiljának optimalizálása. Modellt állítottak fel a PIII beltéri napelemek vizsgálatára, és a mérési eredmények lineáris kombinációjával valamint a modell extrapolálásával szimulálták a napelemek vegyes megvilágításokra adott lehetséges válaszait.

Folytatták a közeli infravörös tartományban működő LED-ek kutatását, alkoholmérésre optimalizálták az 1220 nm csúchullámhosszú diódát. Szénhidrogének mennyiségi meghatározására előnyösen az 1670 nm LED használható. A chip konstrukciójának optimalizálásával sikerült a melegedés okozta optikai teljesítménytelítődés, azaz hatásfokcsökkenés okait eliminálniuk.

A 2007-ben zárult projekt keretében vízben oldott kőolajszármazékok gyors terepi mérése volt a cél. Megállapították az optimális hullámhossztartományt, optimalizálták a sugárforrás emissziós spektrumát és a sugárzási térszöget. A sugárforrás egy pontszerű sugárzó felülettel rendelkező InGaAs/InP lencsével ellátott LED, amelynek a nyálábja egy hosszú küvettán halad keresztül. Az optikai abszorpció egy nagy felületű PbS fotoellenállással, vagy gyűjtőlencsével ellátott InGaAs detektorral hatékonyan mérhető az 1700 nm körüli hullámhossztartományban. Az IR-LED spektrumának hangolása egyszerűen, az interferencia szűrő elforgatásával történik, bár mennyiségi analízisre a NIR abszorpciós spektroszkópia csak megfelelő kalibrációs módszerekkel használható.

Olcsó, korlátozottan reflexiómentes, kis helyen elvégezhető zártterű elektromágneses környezetállósági és környezetszennyezési vizsgálat céljára a *rádiófrekvenciás tér közvetlen mérésére* (a vizsgálandó tárgy helyén) *szolgáló szondát* valósítottak meg.

### *Nanotechnológiai Főosztály*

A főosztály kiemelt feladata nanoanalitikai (pásztázó szondás, XRD és FESEM) és nanopreparációs (nanomegmunkáló állomás, nanocsőelőállítás, kerámiakompozitok), valamint elméleti szimulációs lehetőségeinek felhasználásával *természetes és mesterséges nanoszerkezetek kutatása*.

Nanoszerkezetek Osztály (11 fő): Kutatási tevékenysége a szén nanoszerkezetek és azokat tartalmazó összetett anyagok, a természetes fotonikus kristályok és optikailag aktív nanorendszerek vizsgálata valamint a nano-megmunkálás fizikai-kémiai alapjainak tisztázása köré csoportosítható.

Néhány rétegű grafit (NRG) és grafén előállításának több módszerét is vizsgálták. Sikerült mechanikai leválasztással AFM – STM mérésekhez megfelelő méretű grafén kristályokat előállítaniuk Si/SiO<sub>2</sub> hordozón, melyeken kopogtató és kontakt üzemmódú AFM méréseket végeztek. Összevetették az AFM mérésekből és a Raman mérésekből származó vastagságadatokat és azok jó egyezést mutatnak.

Exfoliált, néhány rétegű grafitlemezek spontán szerveződését figyelték meg oldószerben való ülepedés során. Atomi felbontású STM felvételekkel kimutatták, hogy egy grafitlemezen belül a grafén rétegek ABAB elrendeződést mutatnak, akárcsak a HOPG grafit rétegei. T-AFM mérésekkel kimutatták, hogy a grafitlemezek termikus oxidációval vékonyíthatók. Sikerült három atomrétegnyi grafitlemezről egyetlen rétegű lemezt (grafén) kapniuk.

Kidolgoztak egy *STM litográfián alapuló eljárást*, amely az atomi felbontású leképezést kombinálja az STM felületmódosító képességével, és amelynek segítségével közel atomi pontossággal lehetséges a grafén szalagok „méretre szabása”, akár 2,5 nm-ig, a ma létező legjobb felbontásig, miközben a szalagok krisztallográfiai orientációja is kontrollálható.

A 2006-ban épített CNT növesztő berendezést átalakították, hogy alkalmas legyen folyékony halmazállapotú szénforrások (pl. benzol, toluol, xilol) alkalmazásával szén nanoszerkezetek növesztésére. Felhasználásával homokszemcsékre növesztettek nanoszerkezetű szén bevonatot vízben található kis mennyiségű olajszenyveződés megkötésének céljából.

Kísérleti elrendezést építettek lepkeszárny darabok optikai reflektanciájának mérésére különböző gázok/gőzök környezetében. Megállapították, hogy a gázok hatására a spektrális fényvisszaverés reverzibilisen és reprodukálhatóan változik. A különböző pikkely-szerkezetek jelentősen eltérő módon viselkednek, ezáltal több lepkeszárny kombinációjával lehetőség van *szelektív gázérzékelésre*, azaz, az érzékelt gáz/gőz azonosítására.

Újszerű fotonikus kristály típusú nanoarchitektúrát tártak fel a *Chrysid rypheus* lepke egyes pikkelyeiben, amely úgy is tekinthető, mint nem egész dimenziójú szerkezet.

Olcsó és egyszerű módszert alakítottak ki *bioinspirált fényvisszaverő rétegek előállítására*. Vékony In réteget, ill. szemcséket iktattak be párologtatott Si/SiO multirétegekbe. Hőkezeléssel az In szemcsék átalakulnak, In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> keletkezik, a folyamat optikai spektrális változásokban is követhető. A megvalósított kvázi-rendezett szerkezet, nagyon jól modellezi az *Albulina metallica* lepke pikkelyeinek szerkezetét.

Sikerült funkcionális, többfalú szén nanocsövek kontaktálását platina elektronsugaras deponálással (EBAD) megvalósítani. A kontaktált nanocsöveken I(V) méréseket végeztek, folyamatban van a funkcionális és funkcionizálatlan nanocsövek gázérzékelési tulajdonságainak összehasonlítása.

A korábban kifejlesztett *hullámcsomag dinamikai* (az időfüggő Schrödinger egyenlet megoldásán alapuló) *programcsomagjuk* használhatósága igen nagymértékben megnőtt azáltal, hogy interaktív, egyszerű Web-böngészőn át elérhető felhasználói felületet készítettek hozzá. *A programcsomag mind a kvantummechanikai rendszerek tudományos vizsgálatában, mind az oktatásban kiválóan alkalmazható, hézagpótló szerepet tölt be.*

**Kerámiák és Kompozitok Osztály (7 fő):** Az osztály kutatási tematikája három éve lényegesen módosult, távlati cél új tulajdonságú kerámiák és keramikus kompozitok előállítása lett a mikro- és nanostruktúra módosításával.

Lényeges előrehaladás történt a karbonnal erősített szilícium-nitrid alapú kompozitok szerkezetének megértésében. A villamos vezetőképességet a karbon fázis mennyisége és

eloszlása határozza meg. Ha a kerámia váz ki tudott alakulni, a vezető fázis csak az üregekben foglalhat helyet. Esély van a kristályos szemcséket összekötő amorf fázis megtervezésére.

A technológia különböző fázisaiban oxidáló hőkezelést alkalmazva elérték, hogy  $\text{Si}_2\text{N}_2\text{O}$  fázis alakuljon ki. Kísérleteket végeztek réteges kompoziton, különböző karbon nanocső, illetve korom tartalmú rétegeket kombinálva igen biztató eredményeket kaptak.

Biokompatibilis, hidroxipatit-tartalmú nano/mikroszemcsés kompozitokat fejlesztettek ki tojás héj felhasználásával. Sikerült kidolgozniuk egy egyszerű, telített gőzfázisból történő rétegleválasztási eljárást, amely alkalmas hidroxipatit hordozók kalciumfoszfát nano- és mikrorétegekkel, szálakkal való bevonására. A rétegek létrehozásával lényegesen megnövelhető a kompozit szilárdsága.

Folytatták a polimer alapú biokompatibilis kompozitok előállítását és vizsgálatát. Egy új eljárással, ún. „electrospinning”, elektromos fonás segítségével, mikro- és nanoszálak morfológiájú, tehát nagy porozitású, nagy fajlagos felülettel rendelkező, biodegradábilis polimer – hidroxipatit kompozitokat állítottak elő. A polimer szálban diszpergáltatott nanoszemcsés hidroxipatit várhatóan a csontosodás kialakulásában és a csontsejtek elterjedésében játszhat szerepet.

Folytatódott a „Nyitott szerkezetű volfrámoxidokból és rokonvegyületeikből készített érzékelő rétegek fejlesztése és jellemzése” projekt. Ennek keretében, nyitott szerkezetű, de egyidejűleg nanoszemcsés morfológiájú volfrámoxidok előállításával és ezek vékonyréteggként való alkalmazásával eredményes kísérleteket végeztek ammónia és nitrogén-dioxid gázok érzékelésére.

Ez évben 17,2 M Ft értékben gyártottak kerámia alkatrészeket a GE megelégedésére. 2007-től a kerámia alkatrészek forgalmazását az MFA *spin off* cége, az ANTE kft végzi.

Komplex Rendszerek Osztály (5 fő): Az osztály elméleti módszerekkel vizsgálja az önszervező jelenségek és a nem-egyensúlyi fázisátalakulások tulajdonságait olyan rács-modelleken, amelyek az evolúciós játékelmélet és a terjedési jelenségek tárgykörébe tartoznak.

A komplex rendszerek vizsgálatán belül az evolúciós játékelméleti modellek tanulmányozásában sikerült jelentősen növelni a csoport nemzetközi tekintélyét, amit jól fémjелеz a tudományterületről írt első összefoglaló munkájuk.

Az elmúlt év eredményei közül kiemelhető annak felismerése, hogy a társadalmakban az egyének különböző mértékű meggyőző képessége jelentősen segítheti a tisztességes (önzetlen) magatartás kialakulását a mindennapi életben gyakori fogolydilemma helyzetekben.

#### *Szerkezetkutatói Főosztály*

A főosztály feladata korszerű speciális vékony és nanorétegek, bevonatok, ill. nanokompozit rétegek szerkezeti és morfológiai kutatása, önszervező nanorendszerek létrehozása, a felületközeli elektron- és ion-szilárdtest felületközeli kölcsönhatások felderítése, kísérleti (AES mélységi profil) és elméleti vizsgálata (MD szimuláció).

Vékonyrétegfizikai Osztály (23 fő): Az osztály hosszú távú kutatási irányait jelentő feladatai a polikristályos (nanokristályos) vékonyrétegek épülésének és a közben lezajló folyamatoknak, reakcióknak a modellezése; az eredmények alkalmazása konkrét réteg-rendszerekre, új fullerén-típusú anyagok előállítása és vizsgálata, széles tiltott sávú félvezetők kutatása és módszertani kutatások.

Kinetikus Monte Carlo módszerrel részletesen feltárták az fcc kristálylapon képződő fcc és hcp illeszkedésű *monoréteges szigetek növekedését* és összenövését, az illeszkedési hibákhoz kötődő fázishatárok annihilációját. A réz-ezüst rendszerben meghatározták a textúra, a szemcseméret és az összetétel közötti összefüggéseket. A kutatások egy különleges szerkezet, az *epitaxiális nanokompozit* kialakulását eredményezték.

C-Ni és C-Ti alapú vékonyréteg nanokompozitokat állítottak elő. Ezekben a keménység és rugalmassági modulusz is hasonló viselkedést mutat az előállítási hőmérséklet függvényében a 20-800°C hőmérséklettartományban (maximum 200°C előállítási hőmérsékletnél). Ezt a szén mátrix szerkezeti változásai magyarázzák: a keménység és modulusz értékek különbözősége elsősorban a Ni-C és Ti-C kötések erősségére vezethető vissza.

A *FOREMOST projektben* sűrűlódás csökkentő bevonatok fejlesztésében vesznek részt. A kitűzött célt nem szén alapú, új, fullerénszerű nanorészecskék, mint pl. MoS<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub> (10-30 nm átmérőjű), beépítésével próbálják elérni TiN vagy DLC rétegekbe. Az osztály vékonyréteges és mikroszkópos ismereteit/fejlesztéseit alkalmazza a projektben.

Az ipari bevonatok tulajdonságainak kialakulását a saját fejlesztésű „ProcessDiffraction” módszerrel értékelve, saját modellkísérleteik alapján értették meg. Felderítették a TiAlN rendszerben Y adalék hatására bekövetkező köbös-hexagonális váltást, ennek korrózióállóságot javító, de a stabilitást rontó hatásait, illetve az előállítási módtól való függését, amit az ipari partnerek jól tudnak hasznosítani.

Magyarázatot adtak arra, hogy a ZnO félvezető réteg zafírra való növesztésében miért előnyös a MgO puffer alkalmazása. Megmutatták, hogy spinnel réteg képződik és azt is, hogy ez hogyan csökkenti a rács-illesztetlenséget.

A *HYPHEN FP6 projektben* megállapították, hogy a smart-cut folyamattal leválasztott Si és SiC egykristály réteg hibamentes, de a kompozit hordozó felülete a smart-cut miatt enyhén hullámos, a felület durvasága akár rms=5 nm is lehet, de ez speciális módszerekkel rms<1 nm-re csökkenthető. A fenti kompozit (egykristály Si, vagy SiC/SiO<sub>2</sub>/polikristályos SiC) hordozóra MOCVD-vel növesztett rétegekben a diszlokációk sűrűsége a felület közelében  $1-1,4 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ , azonos a klasszikus SiC szeletekre növesztett rétegekben tapasztalt értékkel.

Rétegszerkezetű ásványok szerkezeti rendezetlenségét vizsgálták négy különböző anyagrendszeren a geológus kollégákkal együttműködve.

Felületfizikai Osztály (6 fő): Az osztály fő feladata az Auger spektroszkópia alkalmazása felület- és mélységi profilvizsgálatra.

Elkészült a több célra használható 20 keV-os ionágyú és az új ionsugaras vékonyító. Meghatározták az ionkeveredés jellemzőit 20 keV-os ionokat használva: a Ga bombázást a LEO FESEM berendezésen, az Ar és CF<sub>4</sub> bombázást az új, sajáttervezésű 20 keV-os ionágyúval végezték el. A nemesgáz bombázás kisebb károsodást okoz mint a Ga bombázás, míg a CF<sub>4</sub> molekula bombázás kedvezőbb az Ar bombázásnál is.

Rugalmas elektronszórás spektrometria (EPES) terén jelentős továbbfejlesztést hajtottak végre a kvantitatív mérés irányába, melynek fontos lépése a felületi gerjesztési tényező (SEP) pontosabb meghatározása.

*Molekula dinamikai szimulációkkal* vizsgálták ugrásszerű atomi folyamatok mechanizmusát. Meglepő eredményük, hogy Pt/Al-ban spontán önszerveződő atomi keveredés lép fel. Vélhetőleg egy új típusú atomi transzportfolyamatot sikerült kimutatniuk, amelynek jellemzője, hogy ugrásszerű (tranzien) folyamat és aktiválási energiát nem igényel.

Néhány klaszter/hordozó pár esetében nanoméretű atomfürtök tranziens süllyedését tapasztalták. Ezek a folyamatok ugyan már igényelnek némi aktiválást (1-5 eV/atom atomfürt kinetikus energiát), de még így is meglepően gyorsak és anomálisnak tekinthetők. Normál esetben egy szilárdtest felületére „lőtt” klaszternek ebben az energiatartományban meg kellene állnia, ill. szét kellene esnie a felületen. Ezzel szemben néhány esetben a klaszter gyors süllyedése tapasztalható, miközben az atomfürt egyben marad.

Vékonyréteg-Nanorendszerek Osztály (6 fő): Feladata alacsony dimenziós (0D-2D) szilárdtest nanorendszerek előállítása vékonyréteg és felülettechnológiai módszerekkel, a méretfüggő tulajdonságok (szerkezet, átalakulások és elektronszerkezet) vizsgálata.

Titán, *orvosi implantátumok* lézeres kezelésével mikro-, és nano-morfológiájú felületet alakítottak ki, és rajta funkcionális oxidréteget hoztak létre. A módosítások kedvező hatásúak voltak az implantátumok csontintegrációjára.

Arany nanorétegek elektronszerkezetét vizsgálva megállapították, hogy az méretfüggő. Kimutatták, hogy >60 nm vastag réteg elektronszerkezete ekvivalens a tömbi aranyéval. A 10-30 nm-es vastagságtartományban új állapotok jelennek meg 0,3 eV kötési energiánál, amelyek vastagságfüggést mutatnak. 5 nm-ig vékonyítva a mintát ezek az állapotok erősen csökkennek.

Technológiát dolgoztak ki egykristályos arany vékonyrétegek előállítására csillám hordozón ultravákuumos párologtató berendezésben. Az ilyen szemcse-epitaxiát mutató arany rétegeket, sokféle biológiai és kémiai kísérletben használják hordozóként, és a piacon igen magas áron kaphatók.

Különleges tulajdonságokkal rendelkező felületek kialakítása során megmutatták, hogy a *nanoszekundum időtartamú lézer anyag kölcsönhatás* eredményeként, a 20°-os beesési szögű lézernyaláb által létrehozott szabályos alakzatok a titán felületeken megtalálható szennyeződések, inhomogenitások hatására szabálytalan morfológiai formációkba transzformálódnak.

Reactive deposition epitaxy (RDE) módszerrel (párologtatás közben fűtött hordozóra érkeznek a részecskék) kvantum huzal jellegű vas szilicid nanorészecskéket alakítottak ki.

### *Fotonikai Főosztály*

A főosztály feladata roncsolásmentes (optikai és mágneses) anyagvizsgálati módszerek fejlesztése és alkalmazása, fotonikus kristályok és integrált fotonikai eszközök, optikai-fotonikai elven működő érzékelők kutatása, valamint biomérnöki kutatások folytatása.

Félvezető Fotonikai Osztály (10 fő): Feladataik a félvezető anyagok optikai módszerekkel történő minősítése, új típusú integrált-optikai szerkezetek kutatása, valamint optikai elven működő – ideértve a bioreceptorokat alkalmazó – érzékelő rendszerek fejlesztése.

Hőmérsékletfüggő (4K – 300 K) optikai minősítő méréseket végeztek 3,5  $\mu\text{m}$  hullámhosszig. Egyebek között SiC hexagonális egykristályok (4H és 6H), implantált vékonyrétegek,  $\beta\text{-FeSi}_2$  optikai transzmissziójának; GaAs-en növesztett PbSe film optikai tulajdonságainak vizsgálata folyt a beágyazott félvezető nanoszemcsék méretének függvényében, továbbá LED spektrumok és detektorok spektrális érzékenységének, napelem-szerkezetek, valamint InGaAs/GaAs kvantumgödrök hőmérsékletfüggő fotolumineszcenciájának minősítése.

Folytatták a hullámvezetőnek alkalmas vékonyrétegek növesztését. Kvarchordozón 4  $\mu\text{m}$  vastag 1,75 törésmutatójú szilícium-oxinitrid rétegekből hagyományos lift-off eljárással nem, de fotoreziszt excimer lézeres szelektív ablációjával sikerült a Mach-Zender interferométer

ábrát jó minőségben kialakítaniuk. A bakteriorodopszin alapú optoelektronikai eszközök kutatását végző projektjüket 2008. első félévére meghosszabbították.

A nehézfémek (Ni, As) optikai elvű detektálásának kutatása során megvalósították flagelláris filamentum fehérje receptorok immobilizálását Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> modellfelületeken, a receptor-fehérje réteg vastagságát (átlagosan 10 nm ill. 14 nm) és törésmutatóját ellipszometriai vizsgálatokkal határozták meg. Az immobilizációt a szilanizálás időtartama nem befolyásolja. A következő lépés implantált csatolórácsú chippek felületén megfelelően borított és jó optikai minőségű érzékelő fehérjerétegek kialakítása lesz.

A vízbázisba jutott felúszó szénhidrogének kimutatása során a víz vagy felszínén megjelenő olajréteg által megváltoztatott reflexiós tulajdonságokat vizsgálták. A kidolgozott két eljárás már pár 100 nm vastagságú olajréteg jelenlétét is biztonsággal jelzi. Az első a vízfelszínen megjelenő olaj okozta reflexióváltozást érzékeli képalkotó rendszer segítségével, a második az integrált reflexióváltozást méri az olaj plexitömbre való „felkúszását” követően. A Weszta-T Kft.-vel kifejlesztett kézi műszer a környezetvédelmi monitoring és kármentesítési szakaszban *a gyakorlatban eddig alkalmazott eszközökkel mérhető szabad fázis ezredét is képes bizonyítottan detektálni.*

Katódporlasztással növesztett 100, 3nm-es hidrogénezett rétegekből álló Si/Ge modellrendszereken a DE kutatóival nanoskálájú diffúziós vizsgálatokat végeztek. A kiindulási minták felülete sima, a rétegszerkezet kiváló minőségű, amit az ötödrendű XRD Bragg-csúcs megjelenése igazol. Hőkezelés után a minták felhólyagosodtak, de szerkezetüket megtartva válnak le a Si hordozóról. A kötött hidrogén jelenléte befolyásolja a diffúzióban szerepet játszó felszakadt kötések számát, így igazolták, hogy gyorsítja a diffúziós keveredést.

A különböző méretű szintetizált Stöber-szilika nanorészecskék eltérő ülepedési sebességét kihasználva egy finoman szabályozható perisztaltikus pumpával frakcionálták a nanorészecskéket. A frakcionált minta Langmuir-Blodgett filmjének oldalnyomás-terület izotermája monodiszperzbb rendszert valószínűsít.

Roncsolásmentes Anyagvizsgáló Osztály (14 fő): Az osztály anyagvizsgáló módszerek kutatásával és alkalmazásaival foglalkozik optikai és mágneses elven, beleértve a kvantitatív mikroszkópiát, képfeldolgozást.

Kiemelkedően fontos feladata volt a méltó részvétel (9 MFA résztvevő, 12 előadást, ill. posztert) a 4<sup>th</sup> Int. Conference on Spectroscopic Ellipsometry, ICSE-4 rendezvényein, Stockholmban. (<http://www.icse4.se>, >300 résztvevő), <http://www.icse4.se/awards/index.xml>).

Folyik az optikai modellek fejlesztése sokösszetevős anyagrendszerek ellipszometriai vizsgálatához. nc-Si-ban, nc-Ge-ban és ZnO-ban az Adachi-féle „Model Dielectric Function”-t, CdTe-ban az Aspnes-féle harmadik derivált módszert, SiC-ben pedig kezdeti lépésként egyszerűbb (pl. Tauc-Lorentz oszcillátor) modelleket használtak komplementer vizsgálatokkal (elektromos, RBS) összevetve. Új témaként kezdődött a nanoszemcsés szerkezetek és vékonyrétegek ellipszometriai modellezése bioszenzorikai és (opto)elektronikai alkalmazásokhoz.

Hullámvezetők és diffraktív optikai elemek létrehozása folyik ionimplantációval. Egy új OTKA feladat, az összetett, polimertartalmú felületi nanostruktúrák szerkezetvizsgálata és funkcionális jellemzése ellipszometriával, valamint a gyógyszerhordozóként való alkalmazás lehetősége (ELTE TTK).

Az ANNA FP6 projekt célja egy nemzetközi virtuális mikroelektronikai szerkezet-minősítő labor létrehozása. Ebben szerepel az MFA ellipszometria labor, melynek felműszerezése,

akkreditálása folyamatban van. A projekthez kapcsolódó metodikafejlesztési feladat az ultravékony rétegek, nanokristályos anyagok és sekély implantációs profilok vizsgálata.

Évek óta folytatott *sikeres műszer és módszer-fejlesztési feladatuk a szélesszögű ellipszométer továbbfejlesztése*. A pontforrásból pin-hole kamerába leképező, *szabadalmaztatott szélesszögű ellipszométer* több prototípusa készült el: a multispektrális és a spektroszkópiai megvalósítás. *DAAD-MÖB* támogatás segítségével végezték el a készülék adaptálását cluster-tool vákuumkamrára (FhG IISB). A szélesszögű ellipszométert a tavaly lezárult *CIGS NKFP-projektben* kifejlesztett napelemgyártó pilot-sorba is adaptálják a ZnO vékonyréteg ill. a CIGS (Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>) típusú napelemek félvezetőrétegének minősítésére.

Elkészült egy új gömbtükrös változat is, ami a felületet pontforrásból világítja meg és a visszavert fényt pinhole kamerával detektálja. Sikeres tesztméréseket végeztek 200 mm átmérőjű szilícium szeleteken. Demonstrálták a mérési elv működőképességét rücskös üvegre gőzölt alumínium felületi eloxidálásával kapott nem tükröző felületen végzett mérésekkel.

Digitális tükörmátrixot alkalmazó *kvantitatív Makyoh-topográfias mérést* állítottak össze, és teszteltek kalibrációs mérésekkel. A mérésben alkalmazott korrelációs helymeghatározási eljárás pontosságát elemezve feltárták az egyes paraméterek hatását.

Makyoh-topográfias vizsgálatokat végeztek rozsdamentes acél hordozókon, valamint SiC alapú kompozit hordozók morfológiájának és felületi simaságának meghatározására. SiC/Si heteroszerkezetek és különféle felületi előkészítésű Si hordozók felületi morfológiáját és deformációját analizálták. Vizsgálták PbI<sub>2</sub> kristályok felületi morfológiáját és a kristályok hasított felületén eddig ismeretlen, feltehetően a növekedésre utaló morfológiát fedeztek fel.

Beüzemelték az elektronsugaras litográfiai labort. Optimalizálták az expozíciós paramétereket egyrétegű PMMA rezisztén, a felbontás pillanatnyilag ~50 nm. Korrekciós szoftverrel egy- és kétrétegű reziszt esetében megoldották az ábraillesztést és a proximity korrekciókat. Kidolgozták a lift-off technikát (100 nm átmérőjű 200 nm magas arany oszlopok), a fotolitográfia és az elektronsugaras litográfia technikájának illesztését.

A *mágneses hiszterézis alhurkok mérésén alapuló roncsolásmentes mérés technika* fejlesztése a Universal Network for Magnetic Non-destructive Evaluation keretében folyt. Plasztikusan deformált alacsony széntartalmú acél mintákon, valamint acél lemezek ponthegeztési varratain igazolták, hogy jól nyomon követhető az anyagban bekövetkező degradáció; és hogy ez a módszer a hagyományos eljárásoknál nagyobb érzékenységet biztosít.

A „Logimarker” *AKF projekt* keretében (Suzuki gépkocsik karosszériaelemeinek azonosító megjelölése a cél) kidolgozták a lézerrel beírt vonalkód kiolvasására alkalmas, hordozható, SMD szerelt elektronikát is tartalmazó integrált mérőfej-prototípus három változatát, amit kalibrációs és referenciamérésekkel teszteltek. Az adott frekvenciájú szinuszos mágneses válaszjel mérésére szoftveres keretrendszert fejlesztettek ki, ami implementált digitális lock-in erősítő modult, valós idejű megjelenítő interfészt, jelszűrési, detektáló modult, illetve hibafelismerő kódoló/dekódoló egységet tartalmaz. Iparjogvédelmi, licencátadási előkészületek folytak a gyártó Metalelektro Kft-vel. A roncsolásmentes vizsgálati módszer iránt komoly érdeklődés mutatkozik több potenciális felhasználó részéről.

Folytatták a kvantitatív mikroszkópia fejlesztését orvosi, távközlési, és gyártástechnológiai feladatok megoldására.

Az Időkódolásos aszinkron mobil távközlés integrált monitorozási rendszer fejlesztése keretében biológiai mikroszkópos képek feldolgozása, sejtmag belsejének térképezése, DNS denzitometria és FISH technikával készített minták kvázi valós idejű feldolgozása; az

*időkódolási eljárást megvalósító híd típusú intelligens szenzor fejlesztése* áramköri tervezése, szimulációja volt a feladat. Neurális hálózati elmélet alkalmazásával időkódolt audió jelekben jellegzetes mintákat azonosítottak, modulrendszerű képfeldolgozó programcsomagot, objektum detektálást, kontúr adatok legkisebb négyzetes közelítését valósították meg.

Felhasználói igények alapján fejlesztették tovább és állították üzembe, tesztelték az Imanqó kábelvég ellenőrző berendezést az AXON Kft. kecskeméti gyárában. Megoldották az adatbázis kezelés módosítását, automatikus kábelstruktúra felismerést normalizált autokorrelációval, és az automatikus adagoló és osztályozó vezérlést.

Biomérnöki Osztály (4 fő): Feladatai nagy külső kooperációt igénylő, az MFA hagyományos kutatásaihoz csak részben kötődő területen találhatók.

Az „Intelligens fiziológiai állapotmonitorozó és távfelügyeleti rendszer” kutatása *GVOP támogatással* folyt, célja a vizsgált személyek fontosabb fiziológiai paramétereinek, emocionális állapotának, környezeti terhelésének valósidejű felügyeletének lehetővé tétele. A kifejlesztett rendszer moduláris felépítésű, melyhez különböző szenzorok (EKG, oxigénszaturáció, pulzus, hőmérséklet, mozgásmennyiség stb.) kapcsolódhatnak vezeték nélkül és/vagy vezetékesen. Az adatok feldolgozása két szinten, a monitorozott személynél és a központi feldolgozó rendszerben történik. A monitorozott paraméterek értékelése egyenként és együttesen történhet, megtörtént a vektoriális értékelés egy konkrét alkalmazása is. A rendszer kapcsolódik egy autonóm helymeghatározó (GPRS) berendezéshez is.

A „Nagyfelbontású bioelektromos képalkotó eljárás (BEM) az agyi bioelektromos források tér- és időbeli változásainak nagy pontosságú meghatározása fontos az agyműködés (így pl. a plaszticitás) lényegének a megértéséhez, a diagnosztikai és terápiás eljárások kidolgozásában. Ennek érdekében szükség volt a sokcsatornás (128) EEG adatgyűjtés megvalósítására (MFA), valamint a fejet mint térfogati vezetőt jellemző fejmodell kidolgozása CT/MRI képek alapján (PE KNT) és végül a fenti kettő birtokában az inverz irányú számítás megoldására. Modellvizsgálataik szerint a módszerrel 3-5 mm-es pontosság elérhető.

*Az intézet termelési-vállalkozási tevékenysége*

- Saját fejlesztésű szilícium nitrid kerámia szerszámok kis sorozatú gyártása és értékesítése;
- Speciális felületi akusztikus hullámszűrők (SAW) tervezése és kissorozatú gyártása.

*Infrastruktúra*

Célzott központi támogatás híján az intézet 2007-ben is *saját erőből kényszerült a szükséges felújításokat végrehajtani.*

Mivel az MFA két épületből kiköltözött, csaknem 400m<sup>2</sup> területet szabadított fel, aminek működés költségei a jövőben már nem terhelik. További költségcsökkentés várható a mikrotechnológiai épület-blokkban az elnyert MTA elnöki keret-támogatásból megvalósított zártkörű hűtőrendszer telepítése révén. Részben a fenti lépések, költözések miatt fel kellett újítaniuk egy vákuumtechnikai labort és 8 dolgozószobát. Főként az intézet alapításának 50 éves évfordulója okán újították fel az MFA központi épületének előterét is. Ugyanabban az épületben további két labor felújítása vált elkerülhetetlenné.

Az ellipszometriás mérőlabor felújítására az ANNA FP6 projektben vállalt kötelezettség miatt került sor. Eszerint a nemzetközi partnerek mérési igényeink kielégítésére az MFA-nak akkreditált mérőlabort kell létesítenie.



### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége: Az MFA-ban öt kinevezett egyetemi tanár (két tanszékvezető), egy docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozik. Vezető munkatársaik zöme oktatott az ELTE, BME, SE, PE, DE, ME, SZTE, PTEK, BMF különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, doktori és habilitációs tanácsának. Az intézetben működik a veszprémi Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar Nanotechnológia Tanszék Nanoszenzorika Professzori Laboratóriuma és az MFA-ELTE elektronmikroszkópiai közös labor. Külső támogatás nélkül rendszeres gyakorlatokat tartanak preparatív és analitikai laborjaikban a graduális és posztgraduális képzés számára. 2007-ben 20 hallgató folytatta az intézetben PhD-kutatásait, akik közül tavalgy hárman szereztek PhD-fokozatot (mindhárman *summa cum laude* minősítéssel!).

Részyétel a hazai tudományos közéletben: Az MFA adta az MTA Műszaki Osztály elnökét, a MAB egy albizottsági tagját, a Széchenyi Díj egyik albizottságának egy tagját, az NKTH „Anyagok és nanotechnológia” EU-tanácsadótagját, a Bay ZAKA kuratóriumi tagját. Egy fő MTA doktorképviselőt, egy fő AKT tagot, egy tagot az Élettelen Természettudományi Kuratóriumba; az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság újraválasztott elnökét és 7 tagját, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság három tagját, az MTA Anyagtudományi Komplex Biz. négy tagját, az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Bizottság egy tagját, az MTA Orvosi Informatikai Munkabizottság egy tagját, a VEAB Egészségügyi Informatikai Munkabizottság elnökét, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagját, az OTKA Elektrotechnikai és Elektronikai Zsűri egy tagját, az ELFT újonnan választott főtitkárát, tiszteletbeli elnökét, az ELFT tanács egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport titkárát, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport vezetőség egy tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat 2 vezetőségi tagját, az OM IST zsűri egy tagját, az Egészségügyi Telematikai Munkacsoport egy tagját.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok: Thin Solid Films, MICRON, valamint a „The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy” szerkesztőbizottsági tagja, „IEEE Sensors Journal” szerkesztőbizottsági tagja, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca szerkesztőbizottsági tag, Híradástechnika szerkesztőbizottsági tag, EPS Council tag, E-MRS Council tag, IUPAP C13 Biz. tag, Bohmische Phys. Soc. (USA) Councillor, International Society of Electrocardiology vezetőségi tag, IUVESTA hazai képviselő, IUVESTA Nemz. Bizottság elnök, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, EUROSENSORS International Steering Committee tag, ENIAC Mirror Group képviselő.

A nemzetközi kapcsolatok: MFA a World Forum of Materials Research Institutes tagjává vált egy megtisztelő meghívás kapcsán. Az intézet egy munkatársa tagja az EU Priority 3 (Nano and Materials) Programbizottságának és öten rendszeres bírálók az Európai Bizottságnál.

Az intézményekkel való szervezett kapcsolatok teljes felsorolásától el kell tekinteni, hiszen több mint kétszáz intézményt kellene szerepeltetnünk. A rangos egyetemek (Cambridge, NIMS – Tsukuba, Osaka, Tokyo, Tohoku-Sendai, Linköping, Erlangen, Namur, SUNY Stony Brook, Barcelona, Thessaloniki, Istanbul, TU Helsinki, Krakow, Wien, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center stb.) mellett 2007-ben is olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Peugeot-Citroen, Mahle, Rolls-Royce, Renault, GE Hungary, Tateyama, Electronics Oy, VIDEOTON, Weszta-T stb.

Gyümölcsöző a kutatási-oktatási kapcsolat a Babes-Bolyai Egyetemmel (Kolozsvár) és a Sapientia Egyetemmel.

Az intézet a beszámolási évben három orosz, két-két belga, cseh, szlovák, bolgár, lengyel, és egy-egy ukrán, olasz, román MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápolt. TÉT támogatással két görög, egy-egy spanyol, szlovén és horvát, japán, dél-afrikai, francia és osztrák kapcsolatuk volt, valamint két DAAD-MÖB cserét működtetettek. Az egyezményes együttműködés zökkenőmentesen, a KPI által kezelt TÉT továbbra is sok adminisztrációval, és akadozva működik.

A kétoldalú kapcsolatok továbbra is jól működnek, szinte kivétel nélkül közös publikációkat eredményeznek, és nagy segítséget nyújtanak nemzetközi pályázatok előkészítésénél is, tehát feltétlenül hasznosak.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

##### *Hazai pályázatok*

- *OTKA*: A tárgyévben négy új OTKA pályázatuk nyert összesen 90 M Ft támogatást.
- *NKTH*: Az intézet 3 új Jedlik Ányos pályázatot nyert az új pályázat kiírási rendszer szerint ipari cég által vezetett konzorciumokban. Az MFA össz-támogatása 157 M Ft.

##### *Nemzetközi pályázatok*

###### A 2007-es év során indult FP6-os pályázatok:

- *ANNA*, European Integrated Activity of Excellence and Networking for Nano and Micro-Electronics Analysis, éves támogatás: 58,5 M Ft
- *INTAS*, támogatás évi 5 M Ft
- Természetesen a korábbi években nyert hat EU FP6-os projekt is folyamatos munkát adott 2007-ben. Az EU és NKFP pályázatok kifejezetten a gazdasági hasznosulást célzó, ipari partnerekkel folyó, sőt általuk koordinált kutatás-fejlesztés. Az *MFA részvétele valamennyi esetben saját indítású alapkutatási eredményeinek a hasznosítására épül!*

FP7-es pályázatok: Az MTA MFA kutatói (az intézeti adminisztráció támogatásával) 28 pályázatot adtak be az FP7-es projektekre a 2007-es év során. Ezek közül négy pályázat már támogatást nyert, de a projektek 2008-ban indulnak. Több potenciálisan sikeres pályázatuk van várólistán.

##### *Díjak, címek, fokozatok*

Magyar Köztársasági Érdemrend Tisztikeresztje, BME gyémántdiploma, MTA-Bolyai-plakett, MTA Főtitkári dicséret, Junior Prima Díj a magyar tudomány kategóriában, Paul Drude díj, Akadémiai Ifjúsági Díj, Magyar Mikroszkópos Társaság konferenciáján (Balatonalmádi, 2007. május 24–26.) a legjobb előadás díja, MFA Kutatói Díjat, az MFA posztdoktori Díj, MFA Ifjúsági Díj és 2 fő MTA Fizikai Tudományok Osztálya Fizikai Fődíját kapta.

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

1. Süle, P, Menyhard, M, Kotis, L, Labar, J, Egelhoff, WF. Jr.: Asymmetric transient enhanced intermixing in Pt/Ti, J. Appl. Phys. 101, 043502 (2007)

2. Agod A, Nagy N, Hórvölgyi Z: Modeling the structure formation of particulate Langmuir films: the effect of polydispersity, *Langmuir* 23: 5445–5451 (2007)
3. Serenyi M, Lohner T, Petrik P and Frigeri C: Comparative analysis of amorphous silicon and silicon nitride multilayer by spectroscopic ellipsometry and transmission electron microscopy, *Thin Solid Films* 515: 3559–3562 (2007)
4. Vértesy G, Tomáš I: Nondestructive indication of plastic deformation of cold-rolled stainless steel by magnetic adaptive testing, *J. Magn. Magn. Mater.*, 310: 76–82 (2007)
5. Basa P, Horváth ZsJ, Jászi T, Pap AE, Dobos L, Pécz B, Tóth L, Szöllösi P: Electrical and memory properties of silicon nitride structures with embedded Si nanocrystals, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 38, Issues 1-2, April 2007, Pages 71–75.
6. Ádám M, Mohácsy T, Jónás P, Dücső Cs, Vázsonyi É, Bársony I: CMOS integrated tactile sensor array by porous Si bulk micromachining, *Sensors and Actuators A: Physical*, Volume 142, Issue 1, 10 March 2008, Pages 192–195.
7. Lugomer S, Maksimovic A, Pető G, Karacs A: Flow instability of fluid-metal layer generated by laser pulse on an inclined metal surface: Experiments and simulation *Appl. Phys. Lett.* 90, 091917 (2007).
8. Sedláèková K, Czigány Zs, Ujvári T, Bertóti I, Grasin R, Kovács GyJ, Radnóczy G: The effect of the carbon matrix on the mechanical properties of nanocomposite films containing nickel nanoparticles, *Nanotechnology*, 18, 445604 (2007)
9. Pécz B, Makkai Zs, Pongrácz A, Bársony I, Deák P, Josepovits KV: Formation of epitaxial SiC nanocrystals, *Surface Science*, 601(13) 2671–2674 (2007)
10. Németh Á, Horváth E, Lábadi Z, Fedák L, Bársony I: Single step deposition of different morphology ZnO gas sensing films *Sensor Actuat B Chem* 127: (1) 157–160 (2007)
11. Cs. Balázsi, F. Wéber, Zs. Kövér, E. Horváth, Cs. Németh, Preparation of calcium-phosphate bioceramics from natural resources, *J. Eur. Ceram. Soc.* Vol. 27, Iss. 2-3, 1601–1606 (2007)
12. Szabó G, Fáth G: Evolutionary games on graphs, *Phys. Rep.* 446: 97–216. (2007)

### *Szabadalmak*

2007-ben 3 hazai és egy külföldi szabadalmukat fogadták el: P9904541: „Eljárás vékonyrétegek, előnyösen fotoreziszt réteg fizikai paramétereinek meghatározására hullámvezetési paraméterek mérésével”, P9904540: „Eljárás fotolitográfiai folyamat exponálási és hívási szakaszának roncsilásmentes nyomon követésére”, P9904539: „Eljárás integrált optikai elem gyártására, továbbá annak alkalmazása hullámhossz-osztott multiplexáló rendszerek hullámhossz-szelektív elemeként”, Külföldi elfogadás: P0104057: „Mérési elrendezés és eljárás félvezető szeletek és más tükröjlegű felületek érintésmentes, gyors, kvantitatív topográfiai vizsgálatára”.

2007-ben két MFA know-how külföldi értékesítésre is sor került.

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

Átlagléltszám <sup>1</sup> :	149	Ebből kutató <sup>2</sup> :	85
PhD, kandidátus:	37	MTA doktora:	17
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			18
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			194
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			194
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	113
nemzetközi együttműködés keretében:	76	SCI által regisztrált folyóiratban:	113
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	197,284	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	2465
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2430
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	3	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	3	<i>ebből</i> külföldön:	1
Értékesített szabadalmak száma:			1
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	62	posztterek száma:	73
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			40
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	34	Gyakorlati kurzusok száma:	24
TDK munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát:	6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	19
			1794
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			706,8 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	18	Teljes saját bevétel:	609,5 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			19,6 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			16
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	44 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			13
NKFP:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	138,1 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	17 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30,8 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			8
EU forrásból:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	97,6 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,3 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			30
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	170,8 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## **RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET**

1053 Budapest, Reáltanoda u. 13–15., 1364 Budapest, Pf. 127.

Telefon: 483–8302, Fax: 483–8333

e-mail: ppp@renyi.hu, honlap: <http://www.renyi.hu>

### **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Az alapítása óta eltelt több mint fél évszázadban a Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet a nemzetközi matematikai élet jelentős központjává vált, és 2007-ben is megőrizte az évek során kivívott rangját, pozícióját.

Az intézet tevékenysége tíz tudományos osztály keretei között folyik. 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.

Az intézet munkatársai közül 2007-ben egy kutatót az MTA rendes tagjává, egy kutatót levelező taggá választottak, egy kutató szerzett akadémiai doktori címet, továbbá egy kutató habilitált. Az év végén 13 akadémikus, 25 akadémiai doktor, 32 (+4 vendég) kandidátus, illetve PhD címmel rendelkező kutató dolgozott az intézetben. Nagy hangsúlyt fektetnek a fiatal – PhD tanulmányaikat folytató vagy azt éppen befejező – tehetségek bevonására az intézeti kutatómunkába. 2007 folyamán további 5 új fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémiától kapott külön keret terhére. Az intézet kutatói a Közép-Európai Egyetemmel közösen folytatott PhD képzés keretében 3 tanulmányait kezdő és 7 disszertációján dolgozó doktorandusz munkáját irányították. Az utóbbi években kinevezéssel felvett fiatalok mellett, a korábbi években odaítélt, de még le nem járt fiatal kutatói ösztöndíjakat is beszámítva, 2007-ben is mintegy 20 fő ígéretes tudományos kutatói utánpótlás nevelésére volt az intézetnek lehetősége.

Az intézet munkatársai – a megelőző évekhez hasonló számban – 2007 során 159 dolgozatot publikáltak, amelyből 152 tudományos publikáció, 7 pedig ismeretterjesztő. A tudományos publikációk közül 4 szerkesztett mű, 1 akadémiai doktori értekezés, 1 könyv, 13 tudományos könyvekben megjelent könyvfejezet, 26 konferencia-kiadványban (16 konferenciakötetben, 10 folyóirat-különszámban), 107 pedig folyóiratban jelent meg. A referált folyóiratokban közölt 117 cikk világnyelveken jelent meg, 109 külföldi folyóiratban, 8 hazai, de ezek a hazai kiadású tudományos folyóiratok is nemzetközileg elismert angol nyelvű kiadványok.

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

Az intézet tudományos eredményeinek felsorolása előtt néhány, a konkrét tudományos eredményeken túlmutató gazdasági-társadalmi haszonnal járó eredmény:

Az intézet változatlanul a magyarországi bioinformatikai kutatások egyik vezetője, amit számos tény igazol: az intézet adott otthont a Magyar Bioinformatikai Társaság 2007. évi tudományos ülészakának, sikeresen valósítja meg a Hungarian Bioinformatics EU-pályázat

célkitűzéseit. Közvetlen gazdasági haszonnal kecsegtet, hogy 2007-ben az intézet alvállalkozóként részt vett a DSS Consulting Kft. által elnyert, „*Hatóanyag tervezéshez célmolekulák kiválasztására szolgáló eljárások és ezekre épülő termékek kifejlesztése*“ című GVOP 2005-3.3.3. pályázatban. A feladata statisztikai tanuló módszerek (statistical learning methods) kidolgozása volt, amelyek segítségével kismolekulák fizikai-kémiai paramétereiből lehetett biológiai aktivitást megbecsülni. Három metódust – részleges legkisebb négyzetek, legközelebbi szomszéd, véletlen erdők – implementáltak Java programozási nyelven. Az eredmények megjelenítésére grafikus felületet készítettek. A programok piaci hasznosítását jelenleg a DSS Consulting Kft tervezi. (A témában folyó kutatásokat az Intézet az *Elnöki keretből* is támogatta.)

A nagy hálózatok jelentősége és vizsgálata a világháló, hatalmas kommunikációs hálózatok vagy a parányi mikrochipeken található – szintén óriási méretű – gráfok elmélete betört a tudomány más területeire is, elég csak a Mindentudás Egyeteme előadásaira utalni, ahol a biofizika, illetve elméleti fizika kiválóságai is a kérdésre irányították a figyelmet. A téma kutatásában a Microsoft és az ELTE matematikusaival karöltve a Rényi Intézet munkatársai is részt vesznek, és számos alapvető fontosságú tételt bizonyítottak. A legújabb kutatások szerint nemcsak a gyakorlati vagy egyéb tudományok, de a matematika más ágai, mint az analízis, mértékelmélet, matematikai logika területén is fontos kapcsolódási pontok találhatóak. a téma kiemelkedő nemzetközi eseménye volt a regularitási lemma és alkalmazásainak szentelt, a Rényi Intézetben 2007 januárjában szervezett konferencia. (Az e témában folyó kutatásokhoz is kapott támogatást az intézet az *Elnöki keretből*.)

#### *Algebra Osztály*

- Igazolták a  $C^*$ -algebrák elméletében igen fontos gauge-invariáns egyértelműségi tétel algebrai verzióját, aminek számos jelentős következménye van.
- Megmutatták, hogy a féligöröklődő Bezout-gyűrűk oszthatósági struktúrái éppen a Bezout-félcsoportok.
- Véges csoportok Helly-dimenziójának mintájára bevezették algebrai és Lie-csoportok Helly-dimenzióját, és ennek végességéről szóló eredményeket bizonyítottak.
- Determinánsra és permanensre vonatkozó, ismert egyenlőtlenségek megfelelőit bizonyították paffianra és hafnianra.
- Számítógépes módszereket is alkalmazva karakterizációs tételeket bizonyítottak olyan  $p$ -csoportokra, amelyeknek egyetlen nemtriviális karakterisztikus részcsoportjuk van.
- Újabb eredményeket értek el azzal kapcsolatban, hogy egy csoport kommutativitástól való eltérését különféle módon mérő számok milyen nagyságrendi viszonyban lehetnek egymással.

#### *Algebrai Geometria és Differenciál Topológia Osztály*

- Bebizonyították, hogy szimplektikus felületek egy negatív definit konfigurációját mindig lehet a megfelelő szingularitás egy simításával szimplektikusan helyettesíteni.
- Új invariánsokat találtak Legendre és transzverz csomókra. Ezek segítségével ilyen csomókat tudtak vizsgálni, pl. túlcavart kontakt struktúrákban.
- Megtalálták azon Seifert fibrált 3-sokaságok pontos listáját, melyek nem hordoznak pozitív feszes kontakt struktúrát. Emellett belátták, hogy a Weeks sokaság (a legkisebb hiperbolikus térfogattal rendelkező hiperbolikus 3-sokaság) hordoz feszes kontakt struktúrát.

- Bizonyos nem-izolált komplex felület-szingularitások Milnor fibruma határának teljes topológiai leírását adták.
- Bizonyították Seiberg-Witten-invariánsokra egy rekurzív formulát, mely a Seiberg-Witten-sejtést bizonyítja „splice-quotient” szingularitásokra.
- Bebizonyították a Campillo-Delgado-Guzein-Zade formulát és Neumann-Wahl „End Curve Sejtését”.
- Megadtak egy speciális Hodge-struktúrát, és ezzel pozitív választ adtak Nicholas Katz egy 1996-os kérdésére.
- Belátták, hogy az olyan konnexiókból álló alterek, amelyekre létezik azonos pontokban levő látszólagos szingularitásokkal rendelkező egyenlet, a konnexiók modulusterének egy Lagrange-féle föliázását alkotják.
- Bebizonyították Lisca sejtését: a lencse terek szimplektikus kitöltései megegyeznek a ciklikus hányados szingularitások deformációinak Milnor fibrumaival.
- Algebrai számtest feletti varietásokon hiperkohomologikus kupa-szorozatként állították elő a Brauer-Manyin-párosítást.

### *Algebrai Logika Osztály*

- A típuskihagyási tétel a matematikai logika modellelméletének egyik sokat használt eszköze. Bizonyították, hogy a várakozással ellentétben az elsőrendű logika 2-változós szelete nem rendelkezik a típuskihagyási tulajdonsággal.
- A relativitáselmélet logikai analízisét kiterjesztették a korábban sikerrel vizsgált kinematikai aspektusokról a dinamikai aspektusokra is. Ezzel megindult a relativisztikus dinamika (például Einstein híres  $E=mc^2$  felfedezése) logikai analízisének kiépítése. A relativisztikus tömegnövekedési tételt nagyon természetes, tisztán geometriai axiómákból bizonyították. Megmutatták, hogy ezekből a szikár, ökonomikus axiómákból a relativisztikus impulzus-megmaradás tétele még nem következik.

### *Analízis Osztály*

- A Fourier-Jacobi sorok súlyozott Cesaro szummációjával kapcsolatos tételeket bizonyítottak lokálisan folytonos függvényekre.
- Jackson-típusú tételeket láttak be a homogén approximációs eljárásoknál.
- Különböző terekben minimális polinomok aszimptotikus reprezentációja adódott.
- Megvizsgálták, hogy rácsszerűen elhelyezett körlapok origó körüli elforgatottjai milyen forgatások esetén fedhetik le az egész síkot (egy origó körüli korlátos tartomány kivételével). A megfelelő forgatási szögek halmazára egy Fourier-analízisbeli feltételt adtak.
- Kvantumrendszerek Fisher információjáról és annak a határozatlansági relációval való összefüggéséről születtek eredmények.
- Kutatásokat folytattak a valós redukzív Lie-csoportok reprezentációi témakörében.

### *Diszkrét Matematika Osztály*

- Egy nagyobb, több évre kiterjedő munkában kutatják a regularitási lemma és a kvázivéletlen gráfok kapcsolatát, illetve a gráfsorozatok limitrészének reprezentálását.
- A különféle alkalmazások miatt is a vizsgálatok középpontjába került a „nagy” gráfok karakterizálása: mikor hasonlít egymáshoz, mikor van közel egymáshoz két (nagy) gráf.

Alkalmasan értelmezve gráfokon metrikát, konvergenciát, többek között az derült ki, hogy a „hasonlóságnak” több ekvivalens értelmezése, mérése lehetséges. Mindezek kapcsolatban vannak különböző statisztikus fizikában szereplő fizikai paraméterekkel (különböző energiafogalom) multiway-max-cut-tal, Regularitási Lemmával, property, ill. parameter testing-gel, stb.

- A kidolgozott módszereket tulajdonság-tesztelésre is használták. Ezen belül kiemelkedik a ritka gráfok, illetve a nagyon ritka gráfok tulajdonság-tesztelésére vonatkozó áttörés.
- (A fenti gráfelméleti kutatásokra az *Elnöki keretből* is kaptak támogatást.)
- Aszimptotikus pontossággal meghatározták, hogy tetszőleges  $H$  gráfra legfeljebb hány pont hozzávételével terjeszthető ki egy  $H$ -pakolás  $H$ -design-ná.
- A kombinatorika és a csoportelmélet közötti új, áttörést jelentő kapcsolatot vizsgálva továbbfejlesztették a kvázivéletlen csoportok elméletét. Ennek gyümölcseként a véges egyszerű csoportok átmérőjére, illetve az egyszerű csoportok elemeinek szavakkal való előállítására vonatkozó nevezetes eredményekre jóval egyszerűbb és a korábbinál lényegesen többet adó bizonyítást sikerült adni.
- Extremális hipergráfelméletben jó nagyságrendi becslést adtak adott hosszúságú páratlan kört nem tartalmazó 3-uniform hipergráf élszámára, sőt az eredményeket sikerült általánosítani a nem-uniform esetre is.
- Meghatározták, hogy milyen valószínűséggel nem tartalmaz rácspontot egy fix konvex halmaz egy véletlenül ledobott példánya. Ezt a kérdést, amely a Buffon-féle Tű-problémának egy távoli rokona, sikerült aszimptotikusan megoldani. Véletlen politópokon definiált természetes valószínűségi változókra (például térfogat, csúcsok és lapok száma) sikerült centrális határeloszlás tételeket bizonyítaniuk több esetben is.
- A kulcs, antikulcs, Armstrong-példány fogalmát kiterjesztették komplex-értékű adatbázisokra, különböző konstruktorok jelenlétében. Minimális kulcsrendszerekhez tartozó Armstrong-példányok létezésére elégséges feltételt adtak.
- Gyenge funkcionális függőségek, azaz funkcionális függőségek diszjunkcióinak axiomatizálását adták meg, különböző komplex értéket adó konstruktorok mellett.
- Megoldottak egy gráfok (speciálisan utak) éleihez és pontjaihoz tartozó 01-sorozatokra vonatkozó speciális kódelméleti jellegű problémát, aminek érdekességét az adja, hogy az eredmény homlokegyenest ellenkező a várttal, a kívánt kód két kivételtől eltekintve mindig létezik. Az általános eset vizsgálata azonban még sok nehézséget rejt.

### *Geometria Osztály*

- Geometriai gráfokra vonatkozó vizsgálatokban megmutatták, hogy számos probléma megoldásának kulcsa síkbeli összefüggő halmazok (vagy görbék, néha konvex halmazok) metszetstruktúrájának vizsgálatában rejlik.
- A Tarski-féle sávfedési probléma általánosításaként belátták, hogy ha az  $r$  sugarú körlemez tetszőlegesen konvex cellákra bontják, akkor a cellák szélességeinek összege legalább  $2r$ .
- A sík (ill. a tér) olyan ponthalmazait karakterizálták, amelyek tetszőleges három (ill. négy) pontjukkal együtt az általuk meghatározott szimplex egy előre meghatározott típusú középpontját is tartalmazzák.
- Belátták, hogy egy origóra vonatkozóan csillagszerű testet meghatároz az origón átmenő hipersíkmetszeteinek a területe és a súlypontja. Ha a test konvex, stabilitást is sikerült igazolni.



- Milman sejtését igazolva sikerült karakterizálni azt a leképezést, amely az origót belsejünkben tartalmazó konvex testekhez polárisukat rendeli.
- Megmutatták, hogy egy konvex test eltolt példányaiból alkotható ritka fedések Rogers-féle sűrűségkorlátja olyan elrendezésekkel is elérhető, amely egy rácsszerű rendszer kis számú eltolt példányaiból áll.
- Bebizonyították, hogy ha egy gráf maximális fokszáma 3, akkor reprezentálható  $n$  általános helyzetű ponttal és 7 iránnyal úgy, hogy két csúcs akkor és csak akkor szomszédos, ha a megfelelő pontok által meghatározott irány a 7 adott irány valamelyike.

### *Halmazelmélet és Topológia Osztály*

- Elégséges feltételt adtak arra, hogy egy tér Vietoris-féle hipertere mikor lesz megszámlálhatatlan kompakt.
- Sapirovszkij egy nevezetes tételével kapcsolatban Tkacsuk számos kérdését válaszolták meg olyan első megszámlálható terek megkonstruálásával, amelyeknek nincs pont-megszámlálható  $\pi$ -bázisa.
- Nagata egy nevezetes kérdése nyomán vizsgálták, hogy egy első megszámlálható térnek mikor van első megszámlálható és megszámlálhatóan kompakt szupertere.
- Minden dimenzióban megválaszták Behrends egy kérdését arról, hogy – leíró halmazelméleti szempontból – milyen bonyolultságú ellenpéldák léteznek Banach fixpont tételének megfordítására.
- Bebizonyították Jankovic sejtését, amely azt mondta ki, hogy a folytonos függőlegesen merev függvények épp az exponenciális és lineáris függvények.
- Megmutatták, hogy a tartalmazásra nézve monoton Borel-, ill.  $G_\delta$ -burok létezése független ZFC-től.
- Sikerült példát találni egy kompakt halmazokból álló olyan szigma-ideálra, amely minden véges halmazt tartalmaz, de nem tartalmazza egy sűrű halmaz összes kompakt részhalmazát. A konstrukció új fejezetet nyithat a kompakt halmazok szigma-ideáljainak elméletében.

### *Információelmélet Osztály*

- Folytatva korábbi kutatásaikat a nyilvános kommunikációt (is) felhasználó Shannon elméletileg titkos információátvitel lehetőségeiről, új eredményeket bizonyítottak a több kimenetű csatornák titkossági kapacitásáról, valamint az „oblivious transfer” kriptográfiai fogalom vonatkozásában a zajos csatornák oblivious transfer kapacitásáról.
- Az információs vetületekre és általánosított maximum likelihood becslésekre vonatkozó korábbi eredményük jelentős részét kiterjesztették az entrópiánál, ill. I-divergenciánál általánosabb konvex integrálokra, ill. Bregman távolságokra.
- Folytatták a valószínűségi mértékek I-divergenciája és Wasserstein távolsága közötti egyenlőtlenségekre vonatkozó kutatásaikat. Bebizonyították ilyen egyenlőtlenség átvihetőségét a mértékek alkalmas Markov-mag alkalmazásával kapott képére, ez az eredmény általános módszert ad mérték-koncentráció bizonyítására Gibbs mértékek esetén.
- A gráfok különböző entrópiáira, kapacitásaira és színezéseire vonatkozó kutatásaikat folytatva új eredményeket bizonyítottak gráfok lokális kromatikus számáról és valamilyen gráf szerint különböző permutációkról.

### *Számelmélet Osztály*

- Elliptikus görbéket vizsgáltak, aszimptotikus becslést adva arra, hogy átlagosan mikor lesz egy véges test felett prímrendű.
- Folytatták annak vizsgálatát, hogy az egységkör bizonyos nem megszámlálható, de valamilyen értelemben kicsi kompakt részhalmazai (Kronecker-halmazok) hogyan jellemezhetők az egységkör karaktereivel.
- Vizsgálták algebrai egyenletek megoldhatóságát véges testek nagy részhalmazában, Ramsey-jellegű kombinatorikus módszerekkel.
- Az  $SL(2, \mathbb{Z})$  csoport két tetszőleges Hecke-csúcsformájának Hecke-sajátértékeiből képezett additív konvolúciós összegeket hibatag nélkül felbontották spektrálisan, és a felbontásban szereplő súlyfüggvényeket hatékonyan megbecsülték. Ezzel Atle Selberg egy 42 éves, sokak által vizsgált kérdésére adtak választ.
- Belátták, hogy a  $GL(2)$  csoport egy tetszőleges  $K$  feletti reguláris algebrai csúcsformájához, ahol  $K$  a racionális számoknak bizonyos megszorításoknak eleget tevő másodfokú bővítése, létezik a  $K$  abszolút Galois-csoportjának egy irreducibilis 1-adikus reprezentációja úgy, hogy a két objektum  $L$ -függvénye a  $K$  véges sok prímideálján kívül azonos Euler-faktorokkal rendelkezik.
- Idempotens trigonometrikus polinomok  $p$ -edik hatvány integráljának koncentrációjára vonatkozólag értek el eredményeket, többek között igazolták, hogy  $p > 1$ -re, sőt nyílt halmazokra minden  $p > 0$ -ra és mérhető halmazokra is legalábbis minden  $p > 1/2$ -re fellép a koncentráció.

### *Valószínűségszámítás és Statisztika Osztály*

- Megmutatták, hogy a kétdimenziós végtelen horizontú periodikus Lorenz folyamat szuperdiffúzív.
- Kiterjesztették véges horizontú periodikus Lorenz folyamatra Erdős-Taylor illetve Darling-Kac véletlen bolyongásra talált eredményeit.
- Meghatározták egy tranziens Markov lánc lokális idejének pontos és határ-eloszlását, valamint arra iterált logaritmus tételt és egyéb 1 valószínűségű határérték tételeket bizonyítottak.
- Erős invarianciát bizonyítottak egyszerű szimmetrikus bolyongás lokális idejének növekményei és egy speciális kétparaméteres Gauss folyamat között.
- Wiener-Ito integrálok és elfajuló  $U$ -statisztikák eloszlásfüggvényére adtak minden eddiginél élesebb becslést.
- Alsó határt adtak a Neumann János kétszemélyes játékokra vonatkozó tételében szereplő eloszlás entrópiájára a játék kifizetési mátrixára alkalmazott minimum és maximum operátorok kommutátora alapján.
- A korreláció együttható olyan kiterjesztését adták meg, melyre a nulla korreláció ekvivalens a függetlenséggel.
- Megmutatták, hogy a részleges fontossági mintavételező Markov-lánc Monte Carlo algoritmus által definiált, optimális reverziós útvonalakon bolyongó Markov láncok relaxációs ideje exponenciálisan nőhet a rendezendő permutációk hosszával.
- Konstruáltak olyan Markov-lánc Monte Carlo algoritmust, amely kiegyensúlyozott, gyökeres, uni-bináris fák leveleinek egyenletes eloszlásához konvergál, és megmutatták, hogy a relaxációs idő a fa mélységének polinomiális függvénye.

- Matematikai modellt adtak az immunológiai rendszerre, amelyben a T-sejtek fő feladata a homeosztázis biztosítása.
- Meghatározták az Országos Rák-Regiszterben található legfontosabb betegcsoportokat és becslést adtak a várható élettartamra.

### *Alkalmazások*

A Rényi Intézetben továbbra is elsősorban elméleti alap kutatások folynak; az egyre szűkülő költségvetési támogatás e hagyományosan magas szintű kutatások fedezetére is csak szűkös keretet biztosít. Az akadémiai *Elnöki keret* számos alkalmazott kutatás elindításához, illetve folytatásához adott már lendületet.

A folytatódó bioinformatikai kutatások elsősorban a genom-átrendeződések vizsgálatára koncentráltak, amelyek nemcsak filogenetikai hanem orvosbiológiai szempontból is fontosak. Tovább tökéletesítették az eddigi statisztikai módszereket, mindenek előtt a Markov-lánc Monte Carlo módszert.

Gyakorlati célú kutatások kezdődtek a nagy hálózatokban található különböző részstruktúrák detektálására, amit a rendelkezésre álló hálózat adataiban levő hibák (téves információk, rögzítési hibák) tesznek különösen nehezzé. Ezek a kutatások két fontos témát kapcsolnak össze: a nagy hálózatok vizsgálatát és a hatékony tudásmenedzsment kialakítására irányuló abszolút gyakorlati kutatásokat.

Az alkalmazások szempontjából is egyre fontosabb a hálózatok (fizikai, biológiai, szociális, kommunikációs és egyéb hálózatok) elméletének matematikai megalapozása. Az ebben a témában folyó kutatások kiemelkedő nemzetközi elismerése, hogy 2007 januárjában „*Quasi-random structures, regularity lemmas and their applications*” címmel egyhetes nemzetközi konferenciát szervezett az intézet, amelyen a téma vezető nemzetközi kutatói tartottak előadásokat e robbanásszerűen fejlődő témában folyó kutatások pillanatnyi helyzetéről.

## **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

### *Kapcsolatok felsőoktatási intézményekkel*

Az intézet kutatói számos budapesti és néhány vidéki felsőoktatási intézmény (pl. ELTE, BME, Debreceni Egyetem) munkájában vettek részt állandó oktatóként, különösen 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) ötödik évébe lépett. Jelenleg 5 PhD-tanulmányait kezdő és 12 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, munkatársai a két félév folyamán 13 kurzust oktattak. A CEU és az egyéb egyetemek hallgatóit számba véve 2007-ben intézeti témavezető irányításával 27 PhD-hallgató, 14 szakdolgozó és 2 tudományos ösztöndíjas dolgozott, öten pedig TDK-dolgozatot írtak. Az intézet dolgozói közül kerül ki a Budapest Semesters in Mathematics főleg amerikai diákok részére szervezett angol nyelvű matematikus részképzési program tanárainak többsége is. 2007-ben az intézet 38 munkatársa, a kutatók 46%-a oktatót

valamelyik hazai felsőoktatási intézményben. Az intézet kutatói által 2007-ben tartott egyetemi tanórák száma meghaladta a 3900-at.

Az intézet a korábbi hagyományokat folytatva 2007-ben is fogadott egy egyetemi kollégát vendégkutatóként. Kiválasztásában jelentős szerepet játszott, hogy témája 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 Osztályában, ennek bizottságaiban, az AKT-ben és az Élettelen Természettudományi Kuratóriumban, az OTKA bizottságaiban, a Magyar Akkreditációs Bizottságban, a Bolyai János Matematikai Társulat választmányában és ezen keresztül a MTESZ-ben való részvétel. A Bolyai János Matematikai Társulat elnöke, a Bolyai Kutatási Ösztöndíj Kuratórium elnöke, az MTA Matematikai Bizottság elnöke, a Matematika Doktori Bizottság elnöke és alelnöke, a CEU Doktori Bizottság elnöke és alelnöke, az OTKA Matematika Zsűri elnöke, valamint Magyar Akkreditációs Bizottság Matematika Képzési ági Bizottság elnöke valamennyien az intézet kutatói.

Kiemelendő, hogy a bioinformatikai, illetve nagy a hálózatokra vonatkozó kutatások gyakorlati jelentősége folytán erősödtek az intézet ipari kapcsolatai pl. olyan cégekkel, mint a DSS Consulting Kft. vagy a Montana Zrt.

### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet kutatói hagyományosan nagyon széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Az együttműködés elsősorban közös publikációkban, kétirányú látogatásokban, közös projektekben, konferenciák közös szervezésében nyilvánult meg. Az intézet munkatársai 2007-ben 25 nemzetközi konferencia vagy workshop szervezésében vettek részt, melyek közül ötnnek maga a Rényi Intézet adott helyet. Ezek az együttműködések általában nem igényeltek intézményes formát, és eredményességüket mutatja például a nagy számú közös cikk.

Mind az MTA kétoldalú egyezményes, mind a TÉT kapcsolat keretében megvalósult utazások eredményesen szolgálták a tudományos együttműködést, keretükben eredményes közös kutatások folynak, hasznos információcserére és időnként konferenciárészvételre nyílik lehetőség.

Az intézet kutatói 2007-ben 7 nemzetközi tudományos bizottsági tagságot, 104 nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagságot mondhatnak magukénak, 249 előadást tartottak nemzetközi konferenciákon, sokat közülük meghívott, illetve plenáris előadóként.

2007-ben az intézet öt EU-s pályázat keretében 23 vendégkutatót látott vendégül, összesen 54 hónapra. Ugyanakkor az Európán kívüli országokból, de részben Európából is érkeztek vendégeik más forrásokból (Fulbright, TÉT, OTKA, akadémiai csere, és egyre nagyobb mértékben az intézettől független, a látogató által szervezett forrásból) finanszírozott látogatások keretében is. Az intézet matematikus látogatóinak száma 2007-ben – konferencián résztvevőket nem is számítva – meghaladta a félszázat.

Az intézet által szervezett nemzetközi tudományos tanácskozások időrendi sorrendben az alábbiak voltak:

- *Quasi-random structures, regularity lemmas and their applications*, 2007. január 22–26. 18 külföldi és 21 magyar résztvevővel;
- *Workshop on p-adic Methods and Rational Points*, 2007. május 18–20. 12 külföldi és 10 hazai résztvevővel;
- *Extremal Combinatorics Workshop*, 2007. június 4–8. 32 külföldi és 22 hazai résztvevővel;
- *Geometry Fest*, 2007. június 11–15. 22 külföldi és 23 magyar résztvevővel;
- *Second Workshop on Extremal Problems in Fourier Analysis*, 2007. szeptember 18–24. 13 külföldi és 20 hazai résztvevővel.

Bár természetesen csak néhány nemzetközi résztvevő volt, mégis fontos megemlíteni, hogy az intézet közreműködött a Magyar Bioinformatikai Társaság 2007. évi tudományos előadás-sorozatának szervezésében (2007. október 3.).

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

##### *Hazai pályázatok*

Az intézet kutatócsoportjai továbbra is jól szerepelnek az OTKA pályázatokon, bár itt is fel kell hívni a figyelmet, hogy alapvető fontossága ellenére egyre kisebb összeget biztosít a költségvetés erre a fejezetre. Minden kutató legalább egy, de többnyire két, olykor három projekt résztvevője. 2007-ben öt induló pályázat részesült támogatásban.

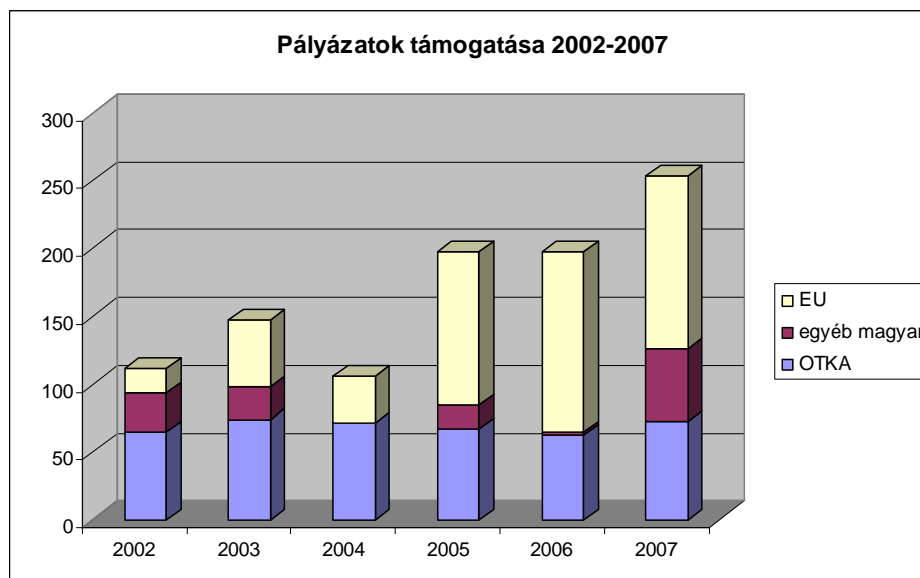
Az egyéb hazai pályázati kiírások általában nem preferálják a matematikai alapkutatást, ezért különösen nagy siker, hogy a Montana Információtechnológiai és Kommunikációs Zrt. vezetésével a „TUDORKA” NKFP pályázatban háromnegyed milliárd forintot elnyerő konzorcium tagjaként, mintegy 70 millió forintos támogatásban részesül az intézet „hatékony tudásmenedzsment eszköz kialakítására gráfelméleti eszközök segítségével”. A projekt 2007 novemberében indult, így konkrét eredmények csak 2008-ban várhatók.

2007-ben az intézet alvállalkozóként részt vett a DSS Consulting Kft által elnyert, „*Hatóanyag tervezéshez célmolekulák kiválasztására szolgáló eljárások és ezekre épülő termékek kifejlesztése*” című GVOP 2005-3.3.3. pályázatban. A projektben az intézet kutatói természetesen elméleti matematikai jellegű kutatásokat végeztek, de a projekt végső outputja remélhetőleg a piacon is hasznosítható speciális programcsomagok létrehozása lesz. Az ezzel kapcsolatos marketing feladatokat a DSS Consulting Kft. végzi.

## Nemzetközi pályázatok

Az intézet kutatásainak finanszírozásába egyre inkább beépülnek az Európai Unió projektjeiből származó bevételek. Jelenleg a legfontosabbak az EU 6. Kutatás-Fejlesztési Keretprogramjában a „Transfer of Knowledge” típusú mobilitási pályázatok négy intézeti nyertese, melyek közül a FIST (diszkrét matematika) és a BudAlgGeo (algebrai geometria) projektek már 2004 végén elindultak, a DiscConvGeo (diszkrét és konvex geometria) 2005-ben, a HuBi (bioinformatika) pedig 2006-ban, valamint a Research Training Network típusú 2004-ben indult Phenomena in High Dimensions projekt. Ez nem csak a kutatások finanszírozása szempontjából fontos – 2007-ben összesen 23 elsősorban, de nem kizárólag európai kutató fogadását, meghívását tette lehetővé, átlagosan 2-3 hónapra – hanem az intézetben folyó kutatómunka nemzetközi elismertségét is bizonyítja.

Bár az évek között természetes a számottevő ingadozás, de mindenképpen figyelemre méltó, hogy az intézet 2005-ös európai uniós pályázati szerződésállománya az előző évek 3-4-szeresére nőtt, mint az alábbi diagramon is látható, és ez a fejlődés 2006-ban és 2007-ben is töretlen. Ugyanakkor két nagy pályázat is lejár 2008-ban, és az így kieső bevételek pótlása gondot okozhat a későbbiekben. Megoldást az újabb EU-s programokban való – egyáltalán nem könnyű – sikeres pályázati szereplés nyújthat. Az első eredmény, hogy 2007-ben olyan kategóriában, nevezetesen az EU 7. Keretprogram Kooperáció kategóriájában jutott a második fordulóba az intézet, amiben eddig sikertelenül pályáztak, mivel az alapvetően elméleti kutatásokat folytató intézet hatalmas hátránnyal indult az ipari végtermék célkitűzésű pályázatokban. Az AGAMEMNON nagyméretű integrált projekt típusú konzorciális pályázat, melynek a vezetője az intézet, a résztvevők között pedig az ipari partnerek mellett olyan neves intézmények vannak, mint az egyik Max Planck Intézet, a Freiburgi Egyetem vagy a kanadai British Columbia Egyetem.



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

1. Bárány I, Vu V: Central limit theorems for Gaussian polytopes, *Annals of Probability* 35 (4): 1593–1621 (2007)
2. Braun G, Némethi A: Invariants of Newton non-degenerate surface singularities, *Compositio Mathematica* 143 (4): 1003–1036 (2007)
3. Csiszár I, Hiai F, Petz D: Limit relation for quantum entropy and channel capacity per unit cost, *Journal of Mathematical Physics* 48 (9): 092102 (2007)
4. Domokos M: Typical separating invariants, *Transformation Groups* 12 (1): 49–63 (2007)
5. Blomer V, Harcos G, Michel P: Bounds for modular L-functions in the level aspect, *Annales Scientifiques de L Ecole Normale Superieure* 40 (4): 697–740 (2007)
6. Kroó A, Peherstorfer F: Asymptotic representation of  $L_p$ -minimal polynomials,  $1 < p < \infty$ , *Constructive Approximation* 25 (1): 29–39 (2007)
7. Janelidze G, Márki L, Ursini A: Ideals and clots in universal algebra and in semi-abelian categories, *Journal of Algebra* 307 (1): 191–208 (2007)
8. Nagy B, Matolcsi M, Szilvási M: Order bound for the realization of a combination of positive filters, *IEEE Transactions on Automatic Control* 52 (4): 724–729 (2007)
9. Mátrai T, Sikolya E: Asymptotic behavior of flows in networks, *Forum Mathematicum* 19 (3): 429–461 (2007)
10. Meyer IM, Miklós I: SimulFold: simultaneously inferring RNA structures including pseudoknots, alignments and trees using a Bayesian MCMC framework, *Plos Computational Biology* 3 (8): 1441–1454 (2007)
11. Languasco A, Pintz J, Zaccagnini A: On the sum of two primes and  $k$  powers of two, *Bulletin of the London Mathematical Society* 39 (5): 771–780 (2007)
12. Pyber L, Segal D: Finitely generated groups with polynomial index growth, *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik* 612: 173–211 (2007)
13. Green BJ, Ruzsa IZ: Freiman's theorem in an arbitrary abelian group, *Journal of the London Mathematical Society-Second Series* 75 (1): 163–175 (2007)
14. Lisca P, Stipsicz AI: Ozsváth-Szabó invariants and tight contact three-manifolds, II, *Journal of Differential Geometry* 75 (1): 109–141 (2007)
15. Gyárfás A, Ruszinkó M, Sárközy GN, Szemerédi E: Three-color Ramsey numbers for paths, *Combinatorica* 27 (1): 35–69 (2007)
16. Bakács T, Mehrishi JN, Szabados T, Varga L, Szabó M, Tusnády G: T cells survey the stability of the self: A testable hypothesis on the homeostatic role of TCR-MHC interactions, *International Archives of Allergy and Immunology* 144 (2): 171–182 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	104	Ebből kutató <sup>2</sup> :	82
PhD, kandidátus:	36	MTA doktora:	25
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	5
		rendes tag:	8
			16
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			159
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			152
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	80
nemzetközi együttműködés keretében:	61	SCI által regisztrált folyóiratban:	80
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	65,734	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	952
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			728
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	1	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	13
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	1
		levelező tag:	1
		rendes tag:	1
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	249	posztterek száma:	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	104
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			38
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	14	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	79	Gyakorlati kurzusok száma:	33
TDK munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát:	14
		PhD-t:	27
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			3905
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			494 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	12	Teljes saját bevétel:	202 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			20
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	72 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			9
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	44 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			11
EU forrásból:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	122 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt



## SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

1111 Budapest, Kende u. 13–17.  
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 információtechnológia, 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 Intézet által művelt matematikai és mérnöki irányultságú alapkutatói tevékenység adja meg azt a többször bizonyított képességet, hogy szinte azonnal képesek – sokszor proaktív módon – reagálni az informatikai forradalom által szinte naponta hozott újabb és újabb kihívásokra. 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, eGovernment, 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.

A nemzetközi mércével mérhető alapkutatói eredményekre építik az itthon és külföldön is hasznosítható informatikai fejlesztéseket és a magas szintű tanácsadási tevékenységet, egy olyan kiválósági központot célozva, mely vonzó témákat és körülményeket biztosít a tehetséges fiatalok PhD-tanulmányához, alkotó tevékenységük megkezdéséhez.

2007-re kutatási portfóliójuk áttekintését, a szükségessé váló módosítások elvégzését (beleértve új kutatócsoportok megalakítását), valamint hazai és nemzetközi jelenlétük és kisugárzásuk további növelését irányozták elő. A magas szintű tudományos eredmények elérése és publikálása, mint alapkövetelmény mellett a különös figyelmet kívántak az eredmények hasznosíthatóságára, hasznosítására fordítani:

- Az NKFP, Regionális tudásközpontok, Jedlik, IKTA, GVOP programok keretében elnyert jelentős számú projekt magas szintű folytatása, elméleti eredményeken alapuló, további felhasználásokat ígérő megoldások, rendszerek kifejlesztése.
- A futó EU-s projektek sikeres folytatása, illetve lezárása; magas szintű eredményesség a VII. Keretprogram első pályázati fordulójában.
- A nagyobb méretű, interdiszciplináris K+F projektek végzéséhez szükséges kapacitás elérése érdekében, virtuális intézetek, virtuális laboratóriumok kialakítása és működtetése, mind hazai, mind nemzetközi téren.

- Jelenlétük erősítése, új partnerek megnyerése kutatás-fejlesztési, tanácsadási munkák végzésére olyan kiemelt hazai cégekkel, mint a Paksi Atomerőmű Rt, General Electric, IBM, Knorr Bremse, MOL, Magyar Telekom, Bosch, és sikeres, feltörekvő vállalkozásokkal.
- Szerződéses kutatás-fejlesztési együttműködések előkészítése és kialakítása Európán kívüli (elsősorban USA és Japán) intézetekkel és cégekkel.

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

### *Matematika és számítástudomány*

Kombinatorikus számítástudomány, gráfelmélet: Hipergráfok köreivel kapcsolatban általánosították a témakör vezető kutatóinak Ramsey típusú eredményeit. Bevezették az „összeadó” és a „vagy” csatorna közötti átmenetet kezelő kódokat, melyek optimális méretére megadták az első aszimptotikus becsléseket. Folytatták Sidon típusú problémákra vezető szuperponált kódok vizsgálatát, és reguláris esetben exponenciális mértékben megjavították a korábbi eredményeket. Teljes jellemzését adták azoknak az összefüggő gráfoknak, amelyeknek minden feszített összefüggő részgrájában van domináló út. Bebizonyították, hogy ha egy perfekten irányítható gráf ellenpélda az ún. Klikkpár sejtésre, akkor rendelkezik egy bizonyos ritka aszimmetriatulajdonsággal. Több fontos kapcsolatot találtak a véges csoportok majdnem-faktorizációi és a partíciónálható gráfok között. Leírták az irányított gráfok ciklikus háromszögeiből készített gráf páratlan köreinek szerkezetét. Polinom idejű approximációs eredményeket értek el bizonyos gráfok fokszámfeltételek melletti partíciónálására vonatkozóan, az általános esetre pedig bebizonyították, hogy a feladat nem approximálható tetszőleges pontossággal (APX-hard).

Adatbányászat és Web-keresés terén kiterjedt vizsgálatot folytattak nagyméretű, de hiányos adathalmazok szinguláris felbontására, valamint korreláció- és asszociációs szabályalapú ajánló rendszerek kialakítására. Első helyezést értek el a Web spam szűrés területén, a WWW2007 konferenciához kapcsolódó Web Spam Challenge I értékelő fórumon. Módszereik között szerepelnek a korábban általuk kutatott hivatkozás-struktúra jellemzők, az oldaltartalom kereskedelmi jellegének klasszifikációja, a népszerű lekérdezésekhez közeli elírások előfordulása, illetve a hiperhivatkozás spam mérése nyelvmodell-eltérés útján. A dokumentumok közötti hálózati kapcsolatok felhasználásával több klasszifikációs módszert fejlesztettek ki, melyek különféle hasonlósági mértékek szerint súlyozott szomszédságok jóslott osztályozási értékeit aggregálva új jellemzőket hoznak létre. Új heurisztikákat adtak meg nagyméretű, skálafüggetlen gráfok felbontására.

Algebrai kutatásaik során több fontos részeredményt értek el a véges ponthalmazok Gröbner-bázisainak és kapcsolódó struktúráinak (normális halmaz, Hilbert-függvény) vizsgálatában. Az eredmények kombinatorikai és reprezentációelméleti alkalmazásokra vezettek. Új strukturális eredményeket értek el permutációcsoportok szerkezetével kapcsolatosan. A véges csoportok reprezentációival foglalkozó elméleti eredmények felhasználásával sikerült megmutatni, hogy a kvantum-kapukészletek univerzalitása algoritmikusan eldönthető. Polinomidejű kvantum-algoritmust sikerült találniuk a rejtett részcsoporthoz tartozó problémára az ún. extraspeciális csoportokban.

Számítógépes statisztika: Sikerült csökkenteniük a növekedés-optimalis empirikus portfólióválasztási eljárások bonyolultságát. Nem korlátos, stacionárius és ergodikusan idősorok esetében univerzálisan konzisztens, nemparaméteres predikciós szabályokat dolgoztak ki.

A biológiai motivációjú számítástudományi kutatásaik során megmutatták, hogy bizonyos típusú biológiai indíttatású számítási eszközök esetében már kisszámú eszközből is építhető a Turing géppel egyenlő erejű számítási eszköz. Ilyen számítási eszközök a genom fejlődése által motivált, elemi műveletekre épített nyelvprocesszorok (általános értelemben vett grammatikák) együttese, illetve az olyan membrán rendszerek, amelyekben a membránokkal körülvett régiók közti kommunikáció dinamikusan, bizonyos események előfordulása szerint valósul meg. Az elért eredmények újabb bizonyítékait adják annak, hogy az élő szervezetek működését és felépítését utánozó, viszonylag egyszerű modellekből hatékony, nagy műveleti erejű, a hagyományostól eltérő szemléletű számítási eszközök hozhatók létre. Feltételeket határoztak meg környezetfüggetlen grammatikák együttműködése által meghatározott formális nyelvek osztályainak hatékony elemzésére, valamint leírták a kooperáló környezetfüggetlen grammatikák generatív erejét bizonyos, az egyes grammatikáknak az adott munkafázisban mutatott hatékonysága összevetésén alapuló stratégiák esetében.

Sztochasztikus rendszerek, pénzügyi matematika: Vizsgálták a befektetők helyzetértékelését leíró, az egész számegyenesen értelmezett ági függvényekre optimalis stratégiák alapján számított opcióárak érzékenységét. Megmutatták, hogy az árak folytonosak a hasznossági függvény perturbációival szemben, másrészt, hogy az ún. superhedging stratégia közelíthető nagy kockázatérzékenységű modellekből számított stratégiákkal. Kimutatták konzisztens árak létezését folytonos trajektóriájú folyamatok egy osztályára, amely magában foglalja a sűrűlódós piacokat. Sztochasztikus volatilitásmodellel (GARCH folyamatokkal) kapcsolatos véletlen együtthatós, strukturált lineáris rendszerek stabilitására adtak új feltételt. Továbbfejlesztettek egy fundamentális tőzsdemodellt, amelyben a tőzsdei szereplők saját stratégiájukat részben modern játékelméleti megfontolások alapján választják. Rejtett Markov folyamatok (HMM) statisztikai vizsgálatával kapcsolatban korábbi ős approximációs eredményeket kiterjesztettek primitív, nulla elemeket is tartalmazó állapot-átmeneti valószínűségmátrixok esetére.

A gépi tanulás témakörben a végső politika teljesítményére véges idejű, nagy-valószínűségű korlátot adtak a folytonos állapotterű, egyetlen trajektóriából való megerősítéssel-tanulás esetén olyan politika-iterációra, ami egy a Bellman-reziduállal növekvő empirikus hiba minimalizálása által nyerhető. Polinomiális korlátot vezettek le a közel optimalis teljesítményhez szükséges mintaszámra, arra az esetre is, ha a politika-iterációban az iterációk során a köztes politikák értékelő-függvényei közelítő érték-iterációval számíthatók. Az univerzális predikció témaköréhez kapcsolódóan új, partíciós becslésen alapuló, univerzálisan konzisztens algoritmusokat adtak azokra az esetekre, amikor az előrejelzendő sorozat nem korlátos, illetve amikor a sorozat csak egy zajos csatornán keresztül megfigyelhető. Elemezték a Markowitz-féle portfólió-választás (várható érték – szórás) on-line modelljének növekedési rátáját a log-optimalis portfólió választáshoz viszonyítva, a kockázat kerülési paraméter függvényében. Korábbi módszereik finomításával továbbfejlesztették az univerzális adattömörítés területén készített algoritmusait, tovább csökkentve azok komplexitását, ami mobil eszközök esetén különösen nagy jelentőséggel bír.

Operációkutatás: Folytatták kutatásaikat a több szempontú döntési problémák, valamint a kvadratikus, globális és sima optimalizálás terén. Az ún. körpakolási problémák kapcsán az elmúlt évek kiemelkedő eredményeit összefoglaló könyvet jelentettek meg, melyek jelentős

része a szerzők nevéhez köthető. A nagyméretű optimalizálás egyik fontos kérdése speciális struktúrák azonosítása. Az eddigieknél megbízhatóbb eljárást adtak a belső pontos algoritmusok szempontjából különösen fontos, úgynevezett „sűrű oszlopok” detektálására.

Az egyes főbb területek mind tematikai, mind személyi szempontból átlapolódnak, de többé-kevésbé kimondható, hogy a matematika-számítástudomány témakörben 42 kutató dolgozik az Intézetben. A becsült intézeti ráfordítás mintegy 419 millió forint volt, melynek 22%-a pályázati forrás. Kutatás-fejlesztési feladataikat többek között a T-Online, a Fornax ZRt., BÉT Rt., az Econet.hu, a Magyar Telekom NyRt., az AEGON Magyarország Általános Biztosító ZRt, az Emitel ZRt., a Richter Gedeon NyRt. és hazai kis- és középvállalkozások (Pont Rendszerház és Omega Consulting) együttműködésével végzik.

### *Informatika*

A celluláris hullámszámítások és érzékelő számítási rendszerek témakörében 2007-ben a legfontosabb eredményeik az alábbiak voltak:

- Digitális processzor tömb és analóg szenzor tömb kombinálása vált a fő kutatási irányvá, ahol cél a különböző szenzor tömbök integrálása vertikálisan egy chipre. A kapcsolatos optimalizált fordító kidolgozásra és tesztelésre került.
- Elemzést készítettek a TeraHz szenzor-processzor tömb alkalmazhatóságára vonatkozóan. Együttműködés keretében az MTA-MFA munkatársaival megkezdődött az interface specifikáció kidolgozása.
- A CNN Univerzális Gép Modellt megvalósították FPGA-kon és az IBM Cell processzoron; segítségükkel oldották meg az óceán áramlási modellt.
- A Celluláris hullámszámítógép architektúrát kiterjesztették más tömbszámítógépekre.
- Kimutatták, hogy két másodrendű, lokálisan aktív nem oszcilláló cella passzív összeköttetéssel oszcilláló rendszerré alakul, ami a két negyedrendű rendszerre vonatkozó híres Smale féle eredmény jelentős javításának tekinthető.
- Spirál hullámokat előállító oszcilláló celluláris hálózatokat terveztek.
- Eljárást dolgoztak ki az ún. Eden Sziget jelenség létezésére/nem létezésére egydimenziós körbe csatolt bináris celluláris automatán.
- Eljárást készítettek számítógépes káosz viselkedés bizonyítására.
- A celluláris hullámszámítógépen futó algoritmusok területén új, robusztus szegmentáló algoritmust dolgoztak ki az Eye-RIS rendszeren, ami az első kereskedelmi célú vizuális mikroprocesszor tömb, 25.000 processzorral és optikai érzékelővel.

Elosztott események elemzése: Újonnan kidolgozott képi statisztikai eljárásokkal mozgóképek hátterét, mozgó objektumait és az árnyékokat különítették el nagy pontossággal, mindenfajta előzetes megvilágítási vagy alakleíró jellemzők ismerete nélkül. A globális statisztikai optimáló eljárásuk képes tárgy/árnyék felismerésre akadozó videóforrások esetén is. Sztochasztikus optimalizációs eljárásokkal sikeresen detektálják a légi képeken történt változásokat sok év távlatából is, különböző vegetációs időpontban készült légifelvételek automatikus összehasonlításával. Használható algoritmust adtak a köztéri verekedés való idejű detektálására. Megoldották a mozgóképeken az árnyékok, illetve az időlegesen elmozdított tárgyak automatikus érzékelését.

Az emberi látás kognitív folyamatai: A korábbi években kidolgozott VFA-modellt, amely egységes geometriai rendszerbe foglalja a V1 látóközpont irány szelektív sejtjeinek funkcióit, kiegészítették különböző gátlások és egyéb magasabb rendű neuronok informatikai

modelljeivel. A tremoros szemmozgások informatikai szerepét szimulációs és hardver eszközökkel is igazolták. Az eredményekre támaszkodva egy új kamera eszköz tervét készítették el, majd azt laboratóriumi körülmények között meg is építették.

A Virtuális Ember Interfész csoport az ember-gép kapcsolat új formáit kutatja, a számítógéppel animált, virtuális emberek és a virtuális valóság eszközeinek segítségével. Kutatási eredményeik között szerepel a nem-verbális kommunikáció virtuális arcokra épülő kidolgozása és a virtuális valóság eszköztárának bevezetése az oktatásban (BabyTeach program). Ezen eredmények mellett kidolgoztak egy orvosi vizualizációs programot, amely hordozható ultrahang és MRI/CT volumetrikus adatokból szegmentált anatómiai modellek segítségével támogatja az ultrahang helyes használatának elsajátítását.

A Grid-rendszerek kutatása terén kidolgoztak egy új, magas szintű grid szolgáltatási réteget (gUSE: grid User Support Environment) a grid felhasználók támogatására és a grid együttműködési probléma megoldására, mely lehetővé teszi rekurzióval és ciklikus csomópont végrehajtással kiterjesztett DAG típusú workflow-k grides futtatását. A gUSE támogatásával egy workflow különböző csomópontjai egyidejűleg több gridben is végrehajthatók, és transzparens módon elérhetővé válnak a GT2, GT4, LCG-2, gLite és WS middleware-t használó gridek. A gUSE legfelső szintű szolgáltatása, a WS-PGRADE grid portál, grafikus fejlesztési felületet kínál a workflow-k szerkesztéséhez és futási paramétereinek beállításához. Workflow repository szolgáltatása kollaborációs környezetet teremt a WS-PGRADE-en dolgozó fejlesztő és felhasználó közösségek között. A gUSE moduláris, SOA szerkezete lehetővé teszi tetszőleges grid submitter, workflow enactor és grid broker szolgáltatás beépítését az alapszolgáltatások mellé, vagy azok helyett. Ugyancsak a moduláris szerkezet következtében a gUSE telepíthető egyetlen gépen, klaszteren, vagy akár a gridben. Kidolgoztak egy új Grid Meta-Broker (GMB) koncepciót, ami lehetővé teszi a grid alkalmazások szétszórását egyszerre több grid között. World Wide Grid (WWG) koncepciójuk révén a már meglévő, egymással együttműködni nem képes grideket is egyetlen, a világot átfogó grid rendszerként láthat és használhat a felhasználó.

Az elosztott rendszerek témakörben 2007-ben Web-alapú szoftver technológia kutatásokra és kísérleti fejlesztésekre, így digitális könyvtári rendszerek és szolgáltatások kialakítására, valamint csoportszoftver (groupware) fejlesztésekre koncentráltak:

- A japán *RICOH* nagyvállalattal közös, 3 éves kutatás-fejlesztési projekt első éve során szabadalmaztatás alatt álló alapkutatási eredmények születtek (melyek nyilvánosságra hozása és publikálása csak a Japán és USA szabadalmi oltalom megszerzése után esedékes), valamint elkezdték a kutatási eredményeken alapuló szoftver prototípus kialakítását is.
- A *BREIN* (*Business objective driven reliable and intelligent Grids for real business*) EU FP 6 nemzetközi projekt keretében alapkutatási eredményeket értek el a Grid témakörben ontológiaépítés, szolgáltatás integrációs modell és módszertan kialakítás területein. Tesztelték az ágens és kollaboratív technológiák alkalmazhatóságát Grid környezetben.
- A *MIK* (*Mobil Innovációs Központ*) együttműködés keretében az osztályon elkészült a kontextus függő mobil szolgáltatások szemantikus web alapokon nyugvó middleware és platform támogatási architektúrája és kísérleti szoftver implementációja.

Az Intézet ad otthont a *World Wide Web Consortium Magyar Irodájának* 2002. szeptemberétől kezdve. A W3C Magyar Iroda az Internet Web kommunikációs szabványainak magyar elterjesztését és a témakörrel kapcsolatos tudományos konferenciák és workshopok szervezését végzi.

Ágens-alapú szoftvertechnológiák: A *K4Care* projekt keretén belül módszert dolgoztak ki arra, hogy a *K4Care* platform ágens rendszerét tudásreprezentációs alapokról fél-automatikusan lehessen generálni. Az időskorú népesség személyre szabott egészségügyi ellátását célzó *K4Care* projekt integrálja számos régi és új EU ország specializált központjainak és szakembereinek információit, képességeit, szakértelmét és tapasztalatait. A Sintagma NKFP projekt keretében egy fogalmi szintre is kiterjedő, elosztott, virtuális adatbázis kezelésen alapuló, új információintegrációs technológia kialakításában és kísérleti alkalmazásában vettek részt.

Elektronikus Kormányzati Módszertani Központ (EKMK) néven 2006-ban alapított egység elkészítette az Elektronikus Közigazgatás e-learnig sorozat első két anyagát. Sikeresen zárták „Az önkormányzati és földhivatali feladatok kölcsönös elektronikus szolgáltatásokkal és adatokkal való támogatása” című projektet, melynek során elkészítettek és sikeresen bemutattak egy olyan mintarendszert, amely az önkormányzatok által ellátott államigazgatási feladatokat – elsődlegesen az építéshatósági tevékenységet – támogatja elektronikus központi ágazati szolgáltatásokkal és adatokkal.

eLearning téren nyílt forráskódú tananyagszerkesztő közösségi portál fejlesztésében vettek részt, amely a csoportközpontú filozófiának köszönhetően elősegíti a tananyagok közös fejlesztését és használatát. Készítettek egy általános tartalomtárat, melyet úgy alakítottak ki, hogy a lehető legtöbb platformon elérhető legyen, különös tekintettel a mobil eszközökre.

Szintén kiemelt tevékenységi területük a *hálózatbiztonsági rendszerek és felügyeletek* fejlesztése. Az Internet Szolgáltatók Tanácsa által anyagilag is támogatott munka során – *Hun-CERT (Computer Emergency Response Team)* néven – hálózatbiztonsági feladatokat látnak el. Az EU által támogatott AGIS projekt keretében az elektronikus szolgáltatások ellopásának megakadályozását célzó módszerek felderítését és a kapcsolódó járulékos feladatok feltárását végzik. Sikeresen zárták a T-Mobile cég számára végzett, RFID témakörbe eső fejlesztéseiket.

A tágabb értelemben vett informatikai témakörben mintegy 87 kutató dolgozik az Intézetben. A becsült intézeti ráfordítás 876 millió Forint volt, melynek 44%-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.
- *Elosztott események elemzése:* A lakott környezet biztonságának növeléséhez és kényelmesebbé tételéhez járul hozzá az automatizálható videó megfigyelő és visszakereső rendszer kifejlesztése
- *Grid rendszerek:* Az Intézet rész vesz a különböző irányultságú, legfontosabb európai és hazai kutatási, felhasználási projekteken. A kapcsolódó szaktanácsadás, szolgáltatásnyújtás terén jelentős bevétel várható.
- *eLearning:* Kifejlesztésre kerültek azok a technológiák, melyekkel a siker esélyével lehet folytatni a várhatóan növekvő piacért folyó versenyt. Az elektronikus oktatás hozzájárul a hazai munkaerő versenyképességének fokozásához és az esélyegyenlőség javításához.
- *Hálózatbiztonsági rendszerek:* eredményeiket számos hazai internetszolgáltató mellett – többek között – az Alkotmánybíróság, az Onkológiai Intézet és a T-Mobile alkalmazza.
- *eGovernment:* Az eredmények elsődleges felhasználói között elsősorban a Miniszterelnöki Hivatal és a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség említhető. E téren együttműködnek az IBM-

mel és a Microsoft-tal. Az elektronikus közigazgatással kapcsolatos e-learning sorozat nagyszámú résztvevővel folyik.

- *Elosztott rendszerek*: nagymértékű bevételt tudnak felmutatni. A felhasználások körére korábban kitértünk, érdemes azonban a 2006-ban indult, 3 éves, MTA SZTAKI – RICOH kutatási-fejlesztési szerződést itt is kiemelni.

A hasznosításokat részben az Intézet látja el, részben – szerződések alapján – informatikai kisvállalatok végzik. Az informatikai megoldások 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 hátterét a *rendszer és irányításelmélet* adja. E területen a kiemelendő eredmények a következők:

- Az időinvariáns geometriai rendszerelmélet eszközeit kiterjesztették időben változó paraméterű lineáris modellstruktúrákra, az ún. LPV modellekre és így sikerült módszerrel adni bizonyos LPV rendszerosztályok hibadetektáló szűrőinek tervezésére, dinamikus rendszer-invertáláson alapuló szabályozók valamint átkonfiguráló szabályozók tervezésére. Az eredményeket járműirányítási feladatok megoldására alkalmazták.
- A szakaszonként lineáris kapcsolt hibrid rendszerek (switching linear hybrid systems) a hibrid nemlineáris rendszerek egy széles, a gyakorlati alkalmazások szempontjából fontos osztályának leírására alkalmasak. Új módszereket fejlesztettek ki átkonfigurálható irányítórendszerek, pontosabban különböző szabályozók közötti átkapcsolást végző irányítórendszerek irányíthatósági vizsgálatára.

Az *Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpontban (EJIT)* végzett tevékenység az intelligens gépjármű-irányítási kutatásokban hoz új eredményeket. A kutatás fő irányait a korszerű járműfedélzeti irányítórendszerek hibátűrő kialakításának tervezési kérdései, a jármű flották felügyelete és koordinált irányítása, az intelligens vezető nélküli járműirányítási problémák, a szenzorfüzies módszerek alkalmazása (pozíció, mozgásadat és videó információk kombinálása), az elektronikus fék, kormány és menetstabilizátor alkalmazásának kombinált módszerei adják.

A TP-modell transzformáció alkalmazására egy teljes MATLAB implementációt (TP ToolBox) készítettek és ezt számos benchmark feladaton tesztelték. További komplexitás-redukciós eljárásokat dolgoztak ki a transzformáció alkalmazhatóságára nagyobb dimenziós számú feladatok esetében. Bevezették a HOSVD alapú kanonikus forma középpontosított alakját LPV modellek esetére.

A Folyamatrendszerek és irányításuk témakörben 2007-ben született eredmények közül kiemelendők a következők.

- Új módszereket dolgoztak ki N-szintű kvantumrendszerek állapotának becslésére, amelyeknek részletes, matematikai statisztikai elemzését elvégezték és összehasonlították ezeket más, az irodalomból ismeretes eljárásokkal.
- A komplex, nagyméretű folyamatrendszerek dinamikus modellezésére használatos többléptékű (multi-scale) modellezési módszerre alapozva egy olyan módszert fejlesztettek ki, amely a rendszerről rendelkezésre álló meghibásodás hatáselemzés (FMEA), valamint veszély és működőképesség analízis (HAZOP) információk felhasználásával prediktív diagnosztikára és veszteség-megelőzésre is képes. A módszert

az ágens alapú technika alkalmazásával hagyományos diagnosztikai módszerekkel is integrálták.

- Az elméleti eredményekre támaszkodva kidolgozták a Paksi Atomerőmű primerkörének egyszerűsített dinamikus modelljét, és a valós rendszeren normál üzemi körülmények között mért adatok segítségével megbecsülték a modell valós fizikai tartalommal bíró paramétereit. Ez a modell az alapja a primerköri szabályozók együttes újratervezésének (rekonstrukciójának).

*A geometriai modellezés és számítógépes látás területén elért eredmények közül kiemelendők:*

- Genetikus algoritmuson alapuló eljárást fejlesztettek ki szabadformájú mérnöki objektumok alakmódosítására új karakterisztikus görbék felhasználásával.
- Új partíciónáló eljárást vezettek be háromdimenziós középfelületek számítására.
- A Structure-from-Motion feladat megoldására új becselő módszert írtak le, amely kezeli a takarás problémáját.
- Artikulált objektumok rekonstrukciójára csoportosítási (grouping) eljárást adtak, amely tengelyesen vagy pontszerűen kapcsolt mozgó merev részek összeillesztését végzi.
- Videó-alapú háttérmodellezésre új módszert fejlesztettek ki, amely periodikus háttérmozgás esetében is hatékony.
- Artikulált objektumok rekonstrukciójára csoportosítási (grouping) eljárást vezettek be, amely tengelyesen vagy pontszerűen kapcsolt mozgó merev részek összeillesztését végzi.

A mérnöki és üzleti intelligencia téren folytatott kutatások fő célja olyan technikák kutatása és felhasználása, melyek alkalmasak a *változó, bizonytalansággal terhelt* környezetben működő, *összetett* műszaki és gazdasági rendszerek *valószerű* kezelésére, különös tekintettel az *informatika*, az *operációkutatás* és a *tudásalapú módszerek* legújabb irányzataira, egyensúlyt teremtve az *optimálás*, *autonómia* és *kooperáció* terén. 2007-es főbb eredményeik:

- Az igény szerinti tömegtermelést folytató gyárak rövid távú *ütemezési* feladatának ellátására 2006-ban kifejlesztett rendszerüket számos új elemmel gazdagították; ilyenek az átállások számának minimalizálása, a létszámkorlát figyelembe vétele, illetve ezek tetszőleges kombinálása az eredeti célfüggvénnyel.
- Termelési hálózatok vizsgálata, modellezése és hatékony működtetésükhöz szükséges matematikai és informatikai háttér kidolgozása. A vevő és a beszállító számára új megoldásokat vezettek be közép- és rövid távú terveik megosztására. A kifejlesztett rendszer, megtartva a felek autonómiáját – beállítható raktárkezelési politikák mellett – ellenőrzi az esetleges hiányokat, és előre jelzi a kritikus helyzeteket, valamint adott rövid távú ütemezett igényekre különböző elvek alapján szállítási ütemtervet generál.
- Elemezték a termelési rendszerekben bekövetkezett *változások és zavarok kezelésével* kapcsolatos problémakört és kifejlesztették az ún. *MES/Cockpit rendszert*, mely az ütemterv elfogadási felületeken túl, a gyártási folyamatból valós időben érkező adatok alapján támogatja a döntéshozót az eltérések és azok okainak vizsgálatában. Eredményeket értek el az újraütemezési technikák stabilitásorientált kiértékelése terén.
- Nemzetközi együttműködés keretében olyan informatikai megoldásokat fejlesztenek, melyek kis- és közép méretű vállalkozások részére is lehetővé teszik *aktív azonosítók* (pl. RFID-k) használatát termelési-logisztikai rendszerekben.
- *Termelési hálózatok komplexitás-leírására és kezelésére* a gráfelméleten, a sztochasztikus rendszereken és a komplex adaptív rendszereken (CAS) alapuló új, összetett modellt állítottak fel.
- Jelentős eredményeket értek el ütemezési problémák korlátozás-alapú modellezése és megoldása terén.



A számítógéppel integrált gyártás terén kutatásaik súlypontját a kiterjesztett/virtuális vállalatok kapcsolata képezte a „kiterjesztett termékek”-kel, valamint a „lifecycle engineering”-gel és a „service engineering”-gel, figyelembe véve a környezeti szempontokat és a társadalmi elvárásokat is. Alkalmazott kutatási eredményeik fontos projektekhez kapcsolódnak:

- Az e-BEP Leonardo projektben gépjármű-szétszerelést és használt-alkatrész kereskedést támogató e-learning megoldásokat és tananyagokat készítettek.
- Az eMULT EU projekt kapcsán ágens-alapú, tudásbázisú rendszer kidolgozásában vesznek részt a szétszerelő és alkatrészkereskedő KKV-k támogatására.
- A SCULPTOR nevű EU projektben újfajta, prézsszerszám nélküli lemezmegmunkálási technológiák irányítási problémáival foglalkoznak.

Az automatizált irányítási rendszerek témakörben mintegy 83 kutató dolgozik az Intézetben. Az intézeti ráfordítás 720 millió Forintra tehető, melynek 34%-a pályázati forrás. A gazdasági haszonszerzés, illetve haszonszerzési 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.
- *Mérnöki és üzleti intelligencia, számítógéppel integrált gyártás, digitális vállalatok, termelési hálózatok informatikája:* GE-Hungary nagykanizsai fényforrásgyárában (mely a maga nemében a legnagyobb a világon) 2006 májusa óta a termelésstervezést és ütemezést a SZTAKI-ban, a VITAL NKFP-projekt keretében kifejlesztett szoftver végzi. 2007-ben sikerrel implementálták a már említett MES/Cockpit rendszert, valamint a beszállítói láncok koordinált működését támogató logisztikai platformot is. Az utóbbit a GE-Hungary több beszállítójánál (Zalai Nyomda, Petőfi Nyomda, Dunapack ZRt) is bevezették. Eredményeiket – ipari szerződések keretében – a Bosch hatvani, illetve a Knorr-Bremse kecskeméti gyáraiban is alkalmazzák. A megoldások várhatóan sikerrel alkalmazhatóak más – esetleg jóval kisebb – cégeknél is, részben web-es szolgáltatások formájában. Európai kutatási projektek keretében kiemelkedő ipari cégekkel dolgoznak együtt (Bosch, BMW, Siemens, Finn posta stb.). Aláírás előtt állnak K+F szerződések az Audi Hungary-vel, valamint a Hitachi Production Engineering Research Laboratory (PERL) kutatóközponttal.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

2007. november 7-én a Budapesten megrendezésre került World Science Forum-hoz kapcsolódó workshop keretében a SZTAKI-ba látogatott a *National Science Foundation (USA) igazgatója*, Dr. Arden L. Bement, Jr. A találkozó során Dr. Bement betekintést nyert az Intézetben folyó kutatás-fejlesztési tevékenységekbe, nem csak elméleti tudományos előadások, hanem gyakorlati demonstrációk (Rendszer és Irányításelméleti Kutatólaboratórium, illetve Celluláris Érzékelő és Hullámszámítógépek Kutatólaboratórium) keretében is. A workshop célja nem pusztán az USA és Magyarország közötti tudományos

együttműködés erősítése, hanem az innovációs kereslet, valamint a kapacitás- és tapasztalat kínálat közötti találkozás elősegítése volt.

Az EU által adományozott *Centre of Excellence* kitüntető címükhöz méltóan szerepeltek az EU V. és VI. Keretprogramjaiban, ahol egyenként több mint 30 projektben, illetve kiválósági hálózatban vettek/vesznek részt, és projektvezetői feladatokat is ellátnak. Az EU VII. Keretprogramja keretében már hét támogatást nyert projektben résztvevők.

A SZTAKI – elsőként a régióból – 14 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 és működtetését. A Fraunhofer Társasághoz tartozó stuttgarti székhelyű Gyártástechnológia és Automatizálási Intézettel (IPA) budapesti székhellyel már 2002-ben létrehozott Termelés és Üzleti Menedzsment Virtuális Intézet után az elmúlt években több nemzetközi virtuális laboratóriumot alapítottak, többek között a CIM Kutató Központtal (Lugano), az Ipari Technológia-Transfer Központtal (Seibersdorf), a Szófia 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 VRL-KCiP (*Virtual Research Laboratory on Knowledge Community in Production*) is. Új elemként, az Intézet alapító tagja az *European Manufacturing and Innovation Research Association (EMIRAcle)* szervezetnek, ami jogi önálló személyként tud az európai K+F területen fellépni. A SZTAKI volt a kezdeményezője a *Central European Grid Consortium* létrehozásának is, melynek célja a Közép-Európai országok Grid kutatásainak és infrastruktúra fejlesztéseinek összehangolása.

Sokat várnak a RICOH, illetve a Hitachi cégekkel részben már megkötött, részben megkötés előtt álló K+F szerződések keretében folytatott munkáktól.

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 kialakításában, 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 alapkutatási fázisban igen hasznosak, a kutatók élnek is a lehetőséggel.

Több más nemzetközi konferencia szervezése mellett külön kiemelendő a *World Science Forum – Budapest* rendezvény, melyet a Magyar Tudományos Akadémiával közösen rendeztek 2007. november 8-10. között. A világkonferencia témája *Befektetés a tudásba, befektetés a jövőbe* kérdésköre volt. Több mint 60 ország 400 tudósa, gazdasági és közéleti kiválósága vett részt. Célja a világ élvonalbeli tudósai, tudománypolitikai személyiségei, gazdasági és politikai döntéshozói, véleményformáló értelmiségiek számára találkozási alkalmat kínálni a legégetőbbnek tartott kérdések megvitatására: a fenntartható fejlődés és a növekedés összefüggései; a globális tudományban jelenlévő ellentétek, a versenyhelyzet és az együttműködés szükséges tudatosítása; a tudomány megfelelő mértékű támogatása; a

továbbképzés szempontjából a társadalom „átprogramozása” a hosszú távú haszonban való gondolkodásra; a tudomány eredményeinek szabad áramlása.

#### *Részvétel a hazai felsőoktatásban*

Az *egyetemi graduális és 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 működteti. Szintén a SZTAKI kezdeményezésével jött létre a *Magyar Grid Kompetencia Központ* (MGKK) a BME, ELTE és NIIFI részvételével, később csatlakozott a KFKI RMKI is.

Sokéves együttműködés újabb jeleként, a *Regionális Egyetemi Tudásközpontok* keretében, a SZTAKI részt vesz a BME által vezetett *Elektronikus jármű és járműirányítási tudásközpont* projektben. Szintén kiemelendő az Intézet szerepe a *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.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

2007-ben is jelentős számú, az EU által támogatott projekt indult, melyek keretében többségében kiemelkedő egyetemekkel, kutatóintézetekkel és több esetben világhírű cégekkel dolgoznak együtt. Néhányat kiemelve, több, hazai támogatású projekttel együtt:

– *AC/DC Five Days Car projekt (FP7, 2007–2010)*

A projekt célja az európai autógyártók versenyképességének növelése olyan beszállítói hálózat létrehozása és működtetése révén, amely igen rövid, akár 5 napos határidővel képes kielégíteni az aktuális vevőigényeket a személygépkocsik piacán. Az ezzel kapcsolatos feladatok felölelik a termelésinformatika szinte valamennyi kulcsproblémáját: a terméktervezéstől a beszállítói hálózatok szervezéséig. A négyéves futamidejű projekt fő ipari partnerei vezető német autógyártók (BMW, Volkswagen), valamint olyan autóiipari beszállítók, akik maguk is világméretű hálózattal rendelkeznek (Continental, Siemens VDO, ZF Friedrichshafen). A kutatás-fejlesztés egyik iránya olyan moduláris termékstruktúra kialakítása, amely lehetővé teszi a gépjárművek minél későbbi, egyedi igényeknek megfelelő konfigurálását. Az MTA SZTAKI jelenleg a másik témában vesz részt, amely célja olyan, kooperáción alapuló hálózat menedzselési módszerek és kommunikációs infrastruktúra kidolgozása, melyek alacsony raktárkészletek mellett is biztosítják a hálózat minden rétegében a végtermék-gyártóktól elvárt igen magas, közel 100%-os kiszolgálási szintet. A kutatás első évében az Intézet hozzájárult a

kommunikációs protokollok és egy, az adott területre jellemző közös fogalmi rendszer – ún. számítógépes ontológia – kidolgozásához.

– *LiWA: Enrichment tools for Web archive (FP7, 2008–2010)*

A projekt célja a Web tartalom archiválását „élővé” tenni. A Web tartalom hosszú távú megőrzése szolgálhat például tudományos vagy piackutatási célokat, vagy dönthet szerzői jogvitában, stb. A tartalom megőrzése iránt növekvő igényt mutatnak mind a könyvtárak, mind az archiváló szervezetek, mind a kialakulóban levő piacorientált szolgáltatások. A Web tartalom bizonyos sajátosságai, gyors dinamikája, illékonysága, formátum és szolgáltatás variánsai nagy kihívást jelentenek a megőrzés, archiválás területén. A projekt keretében átlépjük a „fagyasztott” pillanatkép megőrzésének kereteit, és a pillanatfelvételek megőrzésén túl olyan „élő” Web archívumot kívánnak létrehozni, amely

1. hosszú távú interoperabilitást valósít meg az archívumok fejlődése mellett,
2. tiszta minőségű, lényegtelen „zajtól” mentes információt tartalmaz,
3. a formátumok széles választékát öleli fel.

A LiWA projektben az MTA SZTAKI szerepe a Web spam szűréssel kapcsolatos részfeladat vezetése, és szövegbányászati feladatok elvégzésében is közreműködnek. Hozzájárulásukat a Web spam szűréssel, a képi és szöveges keresőrendszerekkel kapcsolatos kutatásaik alapozták meg. Európai szintű siker, hogy résztvevői az FP7 Digital Libraries első felhívás 9 támogatást nyert STREP pályázata közül kettőnek.

– *i-TRACS: Intelligent Tracking System for Counter-Terrorism (FP6, 2007–2008)*

Az i-TRACS projekt célja, hogy egy fejlett, széleskörű adatforrásokat integráló nyomkövető rendszer fejlesztésével növelje az EU privát és állami intézményeinek versenyképességét a terror-elhárítás és belbiztonság területein. A projekt megvalósító konzorcium tagjai mind a technológia, mind a törvényi szabályozás, mind pedig a piacon elérhető eszközök ismeretével rendelkeznek. A projekt fő kihívása megtalálni az egyensúlyt a nyomkövetés és a személyes adatok és polgári szabadságjogok védelme között abból a célból, hogy egy társadalmilag elfogadott, hatékony szoftvertechnológia jöjjön létre. A projekt keretében olyan újszerű prototípus valósul meg, amely képessé teszi a megfelelő felhatalmazással bíró szervezetet arra, hogy gyanúsított személyek adatait összegyűjtsék, kapcsolatrendszerüket, mozgásukat nyomon kövessék, és előkészületben levő cselekményeik végrehajtását megakadályozzák. A SZTAKI szerepe a projekt megvalósítása során a rendszer tervezése, illetve olyan adatbányászati eszközök fejlesztése, amelyek az adatok teljes körének összegyűjtése nélkül, csak a gyanúsított személyekre vonatkozó lokális lekérdezésekkel képesek kapcsolati hálózatokat feltárni.

– *TEXTREND: Intelligens szövegbányász alkalmazásplatform (Jedlik 2008–2010)*

A pályázat két, egymásra épülő célja (1) az integrált TEXTrend Platform eszköztár és szolgáltatási bázis létrehozása, ill. (2) az eszköztár demonstrációs alkalmazásainak kidolgozása a gazdasági és szakpolitikai döntéshozatal különböző területein. A TEXTrend platform célja a weben található dinamikus és óriási mennyiségű információ mély elemzése valamely specifikus területen, mint például a tudomány vagy a gazdasági élet. Ez alatt az értendő, hogy szemben a szokásos kivonatolási vagy egyszerűen indexelési szolgáltatásokkal, a weben elérhető adathalmazból minőségileg új információt nyernek ki, aminek az előállítása egyenesen lehetetlen lenne pusztán emberi erőforrást felhasználva. Jó példa a trendek elemzése, ahol a cél az, hogy nagy mennyiségű dokumentumból (blogok, cikkek stb) meghatározzuk, sőt, megjósoljuk a közvélekedés vagy érdeklődés jellemzőit, vagy időbeli változását. Egy másik példa látens (pl. szociális) struktúrák felderítése és egy szempillantás alatt áttekinthetővé tétele automatikus szövegfeldolgozás,

hálózatokat kezelő algoritmusok, és vizualizáció segítségével, pl. egy terület hatalmi és befolyási hálózata esetében. A sort sokáig lehetne folytatni. Ezek a mély információk a megfelelő területeken felbecsülhetetlen értékkel bírhatnak. Gondoljunk a politikai vagy gazdasági döntéshozatalra, vagy a tudományfinanszírozás kérdésére.

- *TRASER, Azonosító-alapú termékkövetési- és web-szolgáltatások KKV-k számára (FP6, 2007–2009)*

A SZTAKI által koordinált EU-VI-os projekt partnerei a változó termelési hálózatokban, beszállítói láncokban résztvevő vállalatok számára fejlesztenek, tesztelnek és dokumentálnak újszerű, nyílt forráskódú megoldásokat a termékek és adataik nyomon követésére. A projekt eredményeként olyan nyílt forrású szoftver-platform jön létre a termékek és adataik nyomon követésére, amely nem igényel költséges kezdeti beruházást, együtt használható a már meglévő, elterjedt, de kevésbé fejlett rendszerekkel, kicsi fejlesztés- és karbantartásigénye pedig nem követeli meg nagy szakembergárda állandó foglalkoztatását. A KKV-knak továbbá lehetőséget ad arra, hogy hozzáférjenek a szállítmányozó cégek árukövető infrastruktúrájához és RFID-olvasóihoz.

- *CORNEA: A szaruhártya új, nagy pontosságú, a klinikai szemészeti gyakorlatban alkalmazható topográfiai vizsgálati módszereinek kidolgozása*

A CORNEA projekt NKTH támogatással, a Semmelweis Egyetem Szemészeti Klinikájával, az ELTE Numerikus Analízis tanszékével valamint egy kisvállalkozással együttműködésben, a szemészeti vizsgálatokban és a látásjavító műtétek előkészítésénél nagy jelentőséggel bíró szaruhártya topográfias módszerek pontosságának javítását tűzte ki célul. Két év elméleti és kísérleti munka után a projekt elkészítette a mérőberendezés klinikai tesztelésre alkalmas kísérleti példányát, amely segítségével egészséges, illetve beteg pácienseken végzett vizsgálatokkal bizonyítást nyert a kidolgozott módszerek pontossága és hatékonysága.

- *RELIAWIND: Reliability-focused research on optimizing wind energy systems design, operation and maintenance (FP7, 2008–2011)*

A projekt célja a megújuló energiaforrások terén egyre jelentősebb szerepet betöltő szélerőművek, szélerőmű farmok megbízhatóságának növelése, különös tekintettel a tengerre telepített rendszerekre, ahol a szervizelési és karbantartási munkálatok sokkal nagyobb költségkihatással bírnak, mint a szárazföldi telepek esetén. Az iparág legjelentősebb európai szereplőivel (GAMESA, HANSEN, ABB, SKF stb.) együttműködve, a SZTAKI feladata az intelligens felügyeleti és diagnosztikai rendszerek kifejlesztése.

- *Újgenerációs vasúti csúszás- és perdülésgátló berendezés a fékhatásosság és a biztonság növelése érdekében*

A GVOP támogatással a Knorr-Bremse és a BME Vasúti Járművek Tanszékkel együttműködésben folyó projekt keretében a vasúti fékek hatásosságának növelését célzó szabályozási módszerek kutatása folyik. A projekt első két évében a fékezés fizikai folyamatainak megértése, a modellépítés, valamint a szabályozás elvi lehetőségeinek kutatása folyt. Kidolgozásra került a csúszásmentes fékezés modell alapú szabályozási algoritmus, melyben fontos szerepet kapott a kerék-sín kapcsolatot jellemző tapadási együttható becslése megfigyelő alapú identifikációs módszerrel. Az algoritmust vasúti szimulációs környezetben tesztelték, és alkalmassá tették a valós körülmények közti implementációra.

- *EJTT: Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont*

A SZTAKI a BME által vezetett *Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont* (EJTT) több projektjében meghatározó szerepet tölt be. Az Intézet kutatásai során szoros

együttműködést alakított ki a konzorciumi partnerekkel, így ipari vállalkozásokkal és egyetemi tanszékekkel. A Tudásközpont célkitűzése, hogy a Magyarországon az elektronikusan irányított jármű és járműrendszerek területén az elmúlt években akadémiai és egyetemi környezetben felhalmozott tudást, és a gyártáson/szerelésen túlmenően kutatás-fejlesztéssel is foglalkozó járműipari háttérrel összekapcsolja, és az így létrejött tudásbázist rendszerezve és továbbfejlesztve az iparág más résztvevői, elsősorban a hazai beszállítók rendelkezésére bocsátja kutatás-fejlesztési szolgáltatás formájában. Különösen fontos az alábbi projektek eredményességét megemlíteni:

- A kommunikációs hálózaton alapuló rendszerirányítás témában nagy hangsúlyt kapott a közúti forgalomirányítás korszerű módszereinek kutatása, ezen belül a kereszteződések, autópályák és gyorsforgalmi utak közlekedésének hatékony irányítása. A kooperatív járműirányítási kísérletek céljából a vezeték nélküli irányítási hálózatok kutatásában és a közlekedésben résztvevő egyedek közötti kommunikációs lehetőségek vizsgálatában érték el fontos eredményeket.
- A gépjárművek aktív komponensei funkcionális integrálási lehetőségei kutatásának célkitűzése az erőforrások jobb kihasználása és a közöttük lévő kedvezőtlen kölcsönhatások kiküszöbölése. Az integrálás megteremtette a megváltozott környezeti feltételekhez alkalmazkodni tudó átkonfiguráló irányítások és a hibatűrő irányítások kialakításának lehetőségét is. Az aktív fék, kormány, felfüggesztés és hajtás összehangolt megtervezése a közlekedésbiztonság növelését, az utazási kényelem javítását és a személy és áruszállítás hatékonyságának növekedését eredményezte.
- A hibatűrő fedélzeti elektronikus C-By-Wire típusú rendszerarchitektúrák megvalósításának vizsgálata során megvizsgálták a lehetséges specifikációs, tervezési, és kivitelezési módszereket. Ennek során előkészítettek egy nagy-megbízhatóságú járműirányítási architektúrát demonstráló prototípust.

Szintén az Intézet és a BME közötti jó együttműködést jelzi, hogy az Intézet szerepel a *Mobil kommunikációs kutatás-fejlesztési központ és innovációs centrum* szervezetben.

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, gyártásautomatizálás, 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, Magyar Telekom, MOL, PA Rt, Knorr Bremse, Bosch, ugyanakkor a kisvállalati résztvevők biztosítékot jelentenek arra, hogy eredményeik a lehető legszélesebb körben terjedjenek el. Tengerentúli (USA, Japán) kooperációik pedig egészen új távlatokat nyitnak.

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

1. Lin, L, Wu, C, Roska B, Werblin, F, Bálya D, Roska T: A neuromorphic chip that imitates ON brisk transient ganglion cell set in the retinas of rabbits. *IEEE Sensors Journal* 7 (9): 1248–1261 (2007)
2. Mozsáry A, Chung, J, Roska T: Function-in-layout: A demonstration with bio-inspired hyperacuity chip. *Int. Journal of Circuit Theory and Applications* 35: 149–164 (2007)

3. Roska T: Circuits, computers, and beyond Boolean logic. *International Journal of Circuit Theory and Applications* 35: 485–496 (2007)
4. Vásárhelyi G, Fodor B, Roska T: Tactile sensing-processing: interface-cover geometry and the inverse-elastic problem. *Sensors and Actuators A: Physical* 140 (1): 8–18 (2007)
5. Csuhaj Varjú, E, Petre, I, Vaszil, G: Self-assembly of strings and languages. *Theoretical Computer Science* 374 (1–3): 74–81 (2007)
6. Gyárfás A, Ruszinkó M, Sárközy G, Szemerédi E: Three-color Ramsey numbers for paths. *Combinatorica* 27 (1): 35–69 (2007)
7. Benedek Cs, Szirányi T: Study on color space selection for detecting cast shadows in video surveillance. *International Journal of Imaging Systems and Technology* 17 (3): 190–201 (2007)
8. Havasi L, Szlávik Z, Szirányi T: Detection of gait characteristics for scene registration in video surveillance system. *IEEE Transactions on Image Processing* 16 (2): 503–510 (2007)
9. Kovács L, Szirányi T: Focus area extraction by blind deconvolution for defining regions of interest. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 29 (6): 1080–1085 (2007)
10. Szlávik Z, Szirányi T, Havasi L: Stochastic view registration of overlapping cameras based on arbitrary motion. *IEEE Transact. on Image Processing* 16 (3): 710–720 (2007)
11. Fazekas A, Csetverikov D: Analysis and performance evaluation of optical flow features for dynamic texture recognition. *Signal Processing: Image Communication* 22 (7-8): 680–691 (2007)
12. Stroud, I, Renner, G, Xirouchakis, P: A divide and conquer algorithm for medial surface calculation of planar polyhedra. *Computer-Aided Design* 39: 794–817 (2007)
13. Antos A, Szepesvári C, Munos, R: Learning near-optimal policies with Bellman-residual minimization based fitted policy iteration and a single sample path. *Machine Learning* (DOI: 10.1007/s10994-007-5038-2): 1–41 (2007)
14. György A, Linder T, Lugosi G, Ottucsák G: The on-line shortest path problem under partial monitoring. *Journal of Machine Learning Research* 8: 2369–2403 (2007)
15. Prangl, M, Szkaliczki, T, Hellwagner, H: A framework for utility-based multimedia adaptation. *IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology* 17 (6): 719–728 (2007)
16. Györfi L, Ottucsák G: Sequential prediction of unbounded stationary time series. *IEEE on Transactions on Information Theory* 53 (5): 1866–1872 (2007)
17. Györfi L, Kohler M: Nonparametric estimation of conditional distributions. *IEEE on Transactions on Information Theory* 53 (5): 1872–1879 (2007)
18. Ivanyos G: Deciding universality of quantum gates. *Journal of Algebra* 310: 49–56 (2007)
19. Janovitz-Freireich I, Rónyai L, Szántó Á: Approximate radical of ideals with clusters of roots. *Mathematics in Computer Science* 1 (2): 393–425 (2007)

20. Kis T, Kápolnai R: Approximations and auctions for scheduling batches on related machines. *Operations Research Letters* 35 (1): 61–68 (2007)
21. Monostori L, Kádár B, Pfeiffer A, Karnok D: Solution approaches to real-time control of customized mass production. *CIRP Annals-Manufacturing Technology* 56 (1): 431–434 (2007)
22. Pfeiffer A, Kádár B, Monostori L: Stability-oriented evaluation of rescheduling strategies, by using simulation. *Computers in Industry* 58 (7): 630–643 (2007)
23. Viharos Z, Kemény Z: AI techniques in modelling, assignment, problem solving and optimization. *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 20 (5): 691–698 (2007)
24. Mészáros C: Detecting „dense” columns in interior point methods for linear programs. *Computational Optimization and Applications* 36 (2-3): 309–320 (2007)
25. Keveczky L, Bányász Cs: Robust stability and performance of time-delay control systems. *ISA Transactions. Journal for the Science and Engineering of Measurement and Automation* 46: 233–237 (2007)
26. Vanek B, Bokor J, Balas G, Arndt, R: Longitudinal motion control of a high-speed supercavitation vehicle. *Journal of Vibration and Control* 13 (2): 159–184 (2007)
27. Vijayaraghavan, K, Rajamani, R, Bokor, J: Quantitative fault estimation for a class of nonlinear systems. *International Journal of Control* 80 (1): 64–74 (2007)
28. Fazekas Cs, Kozmann G, Hangos K: Multiscale modeling and time-scale analysis of a human limb. *Multiscale Modeling and Simulation* 6: 761–791 (2007)
29. Németh, E, Lakner, R, Hangos, K, Cameron, I: Prediction-based diagnosis and loss prevention using qualitative multi-scale models. *Information Sciences* 177: 1916–1930 (2007)
30. Petz D, Hangos K, Magyar A: Point estimation of states of finite quantum systems. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 40: 7955–7969 (2007)
31. Petres Z, Baranyi P, Korondi P, Hashimoto H: Trajectory tracking by TP model transformation: case study of a benchmark problem. *IEEE Transactions on Industrial Electronics* 54 (3): 1654–1663 (2007)
32. Bacsó, G, Tuza, Z, Voigt, M: Characterization of graphs dominated by induced paths. *Discrete Mathematics* 307 (7-8): 822–826 (2007)
33. Bujtás C, Tuza Z: Orderings of uniquely colorable hypergraphs. *Discrete Applied Mathematics* 155 (11): 1395–1407 (2007)
34. Szaniszló Z, Tuza Z: Lower bound on the profile of degree pairs in cross-intersecting set systems. *Combinatorica* 27 (3): 399–405 (2007)
35. Kopácsi S, Kovács G, Anufriev, A, Michelini, R: Ambient intelligence as enabling technology for modern business paradigms. *Robotics and Computer Integrated Manufacturing* 23 (2): 242–256 (2007)
36. Carassus L, Rásonyi M: Optimal strategies and utility-based prices converge when agents' preferences do. *Mathematics of Operations Research* 32 (1): 102–117 (2007)



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	298	Ebből kutató <sup>2</sup> :	205
PhD, kandidátus:	70	MTA doktora:	21
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	8
			90
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			393
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			393
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	66
nemzetközi együttműködés keretében:	87	SCI által regisztrált folyóiratban:	66
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	62,504	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	1786
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1786
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	1	könyvfejezet:	2
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	22
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	7	MTA doktora:	2
		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	217	posztterek száma:	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	79	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	59
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			53
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	33	Doktori iskolát vezetőik száma:	4
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	60	Gyakorlati kurzusok száma:	23
TDK munkát készítő hallgatók száma:	19	Diplomamunkát:	25
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatók órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	54
			2626
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			1448 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	18	Teljes saját bevétel:	1921 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			16
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	43 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			14
NKFP:	14	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	204 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	12	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	126 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			38
EU forrásból:	38	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	352 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			24
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	216 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			40 MFt

## SZILÁRDTESTFIZIKAI ÉS OPTIKAI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós 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*

Egy összefoglaló munkában megmutatták, hogy a kvantum információ elmélete és a szilárdtestfizika egymást megtermékenyítő hatása miként vezet általánosan a kölcsönható kvantum rendszerek, speciálisan a DMRG módszer jobb megértéséhez. A DMRG általánosításával egy új algoritmust dolgoztak ki, amellyel megnyílt a lehetőség számos olyan új fizikai probléma vizsgálatára, amely mind a kvantum informatika elmélete, mind az erősen korrelált kvantum rendszerek tulajdonságainak megértése szempontjából igen lényeges.

A kétágú spin létráknak a renormálási csoport módszerével való analitikus, és a DMRG algoritmussal való numerikus vizsgálatával megmutatták, hogy a keresztcsatolások által okozott frusztráció új fázisok fellépésére vezet.

A spinlétrák alapállapota alacsony hőmérsékleten szinglett, véges energiájú gerjesztésekkel. Mágneses tér hatására az energiarés összeháródik, a tripllett gerjesztések Bose-Einstein kondenzálódnak és Luttinger folyadék fázis jön létre. Kutatásaik során megmutatták, hogy a Dzsalsosinkij-Moriya kölcsönhatás hatására a Bose-Einstein kondenzáció elmarad, a Luttinger folyadék helyett egy energiaréssel rendelkező fázis alakul ki.

Résztvevők: 8 kutató, ebből 7 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 39,2 M Ft költségvetési támogatás, 9,6 M Ft hazai pályázatok.

#### *Komplex rendszerek*

Tanulmányozták a kvantum soktest rendszerek összefonódását és kvantumos nemlokális jellegét. A Neumann féle entrópiának a kvantum kritikus pontban mutatott skálázási viselkedését vizsgálták aperiodikus spínláncokon és kétdimenziós rendezetlenséget tartalmazó rácsokon. A DNS denaturálódását leíró Poland-Scheranga modellben a feltekeredési átalakulás dinamikáját és szerkezeti tényezőjét vizsgálták. Az egydimenziós kinetikus Ising

modellben tanulmányozták a rendezetlenség hatását nagy-skálájú Monte Carló szimuláció segítségével. Csapdázott Fermi gázoknak a Feshbach rezonancián mutatott univerzális tulajdonságait vizsgálták a BCS-Leggett modell segítségével.

Résztvevők: 6 kutató, valamennyien az SZFKI munkatársai. Anyagi ráfordítás: 33,6 M Ft költségvetési támogatás, 12,3 M Ft hazai pályázatok.

#### *Elektronállapotok fémekben*

A kvantummechanika alapelveiből kiindulva megmutatták, hogy a FeCr ötvözetek felületi tulajdonságaiban egy éles átmenet figyelhető meg 9–13% Cr koncentráció körül. Alacsony koncentrációnál a felület csak Fe atomokat tartalmaz, míg nagyobb koncentrációnál energetikailag kedvezővé válik a Cr atomok felületi szegregációja, ami alapvetően meghatározza a rozsdamentes acél korróziós tulajdonságait.

Első elvekből kiindulva megvizsgálták a Be különböző fázisainak rugalmas tulajdonságait. Lényeges különbséget találtak a két fázis anizotrópiájában. Megmutatták, hogy a két fázis közötti átmenet 240 GPa-nál következik be 0 K-n, nagyobb térfogaton a bcc fázis C' rugalmas állandója nullává, így a fázis dinamikusan instabillá válik.

Tanulmányozták réz (100) felületeken levő kisméretű (1–9 atomot tartalmazó) klaszterekben a mágneses tulajdonságok (momentumok, anizotrópia) függését az összetételtől.

Kiszámolták az egy és kétfalú nanocsövek radiális lélegző módusának tulajdonságait, és a Raman szórás kísérleti eredményeinek értelmezésére egy egyszerű modellt dolgoztak ki.

Megmutatták, hogy a d-típusú sűrűség hullámú anyagokban a pszeudogap nagyságát a mágneses szennyeződések megnövelik, amely összhangban van a magas hőmérsékletű szupravezetőkön mért kísérleti eredményekkel.

Résztvevők: 9 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 44,8 M Ft költségvetési támogatás, 8,2 M Ft hazai pályázatok.

#### *Nem-egyensúlyi ötvözetek*

Fe-Ag multirétegekben néhány atomi réteg Fe rétegvastagság esetén a spontán mágnesezettség iránya nem a minta síkjába mutat, amint az alaki anizotrópiából várható lenne, hanem a síkra közel merőleges irányba. A mérések célja annak megválaszolása volt, hogy ez a jelenség mennyiben származhat olyan feszültségekből, amelyek a fedőréteg alkalmazásából, a szubsztrátról való leválasztástól, vagy a mintakészítés hőmérsékletétől, különböző mérési hőmérsékletből erednek. SQUID és Mössbauer spektroszkópiai vizsgálatokat végeztek különböző fedőréteg-vastagság és az átmeneti tartományba eső Fe rétegvastagságú minta esetén széles hőmérséklettartományban (20K–300K). A minták mindegyike szuperparamágneses tulajdonságokat mutatott, ami az ultravékony Fe rétegek véges (azaz nem teljesen összefüggő) síkbeli kiterjedését jelzi. A spontán mágnesezettség irányáról a Mössbauer spektrum mágnesesen felhasadt vonalainak intenzitásarányaiból nyertek információt. Eredményeik azt igazolják, hogy a merőleges anizotrópia az ultravékony Fe rétegű multiréteg minták belső, lényegi tulajdonsága, nem függ a fedőréteg vastagságától és csak kis mértékben függ a hőmérséklettől.

Résztvevők: 5 kutató, valamennyien az SZFKI munkatársai. Anyagi ráfordítás: 28 M Ft költségvetési támogatás, 11,8 M Ft hazai pályázatok.

## *Röntgen diffrakció*

A csoport három területen ért el kiemelkedő eredményeket:

Fullerén molekulákon alapuló kristályokon végzett infravörös és Raman mérések segítségével kimutatták, hogy az alkali-fullerid anyagokban magas hőmérsékleteken a pszeudoforgás dominál a kationok torzító hatásához képest. A kubán-fullerén vegyületek esetén pedig szimmetria-analízisre alapozva egy lineáris szerkezetet javasoltak a co-polimerre. A fentiekben túl átlátszó tiszta szén és funkcionizált nanocső filmeknek az optikai és termikus tulajdonságait vizsgálták. Azt találták, hogy az optikai és Raman spektroszkópiai mérések hasznos információt szolgáltatnak a funkcionizáltság fokára.

Megvizsgálták, hogy az előző években kifejlesztett kristályok szerkezetének ab initio meghatározására alkalmas iteratív algoritmus hogyan viselkedik negatív szórású sűrűség mellett. Azt találták, hogy az alapalgoritmusba beillesztett sávbillentő eljárás segítségével a negatív szórású sűrűség tolerálható. Ez az eredmény elősegíti, hogy a közeljövőben épülő intenzív neutronforrásoknál végezhető mérések esetén is lehessen ab initio szerkezet-meghatározást végrehajtani.

A fázismező elméletet alkalmazták a kétkomponensű eutektikus AgCu ötvözetek egyensúlyi határfelületi tulajdonságainak előrejelzésére. Az eredmények összhangban voltak a kísérleti adatokkal. Ezen túl fázismező szimulációkat végeztek a CH<sub>4</sub> hidrát CO<sub>2</sub> hidráttá való átalakulására folyékony CO<sub>2</sub> jelenlétében. Az eredmények összhangban voltak mag mágneses rezonancia leképzések adataival. A kapott diffúziós állandó magasabb, mint amelyet tömbi anyagra vártak.

A felsorolt eredmények közül eddig még egyik sem hozott közvetlen gazdasági hasznot, de a jövőben mindegyik nagy haszonnal kecsegtet.

Résztvevők: 40 kutató, ebből 17 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 95,2 M Ft költségvetési támogatás, 32,9 M Ft hazai pályázatok, 261 e€ nemzetközi pályázatok.

## *Fémfizika, fémtechnológia és mágnesség*

Elektron kristályok: Tanulmányozták a magashőmérsékleti szupravezetőkben nagy mágneses térben fellépő energiaveszteségeket. Megmutatták, hogy a konvencionális szupravezetőkre érvényes Bardeen-Stephen-törvény itt nem érvényes: az ellenállás nem a térrel, hanem a tér <sup>3</sup>/<sub>4</sub>-edik hatványával arányos, aminek nagy elméleti jelentőségén kívül fontos következményei vannak a gyakorlati alkalmazásokra is. Vizsgálták a szupravezetők mágneses örvényrendszerének alacsony hőmérsékleti rendeződését is. Megmutatták, hogy az átalakulás jól leírható a szerkezeti üvegekben univerzálisan érvényes Vogel-Fulcher-féle félempirikus formulával. Ha viszont olyan nagy áramokat alkalmazunk, amelyeknél a rácshibák hatása már elhanyagolható, akkor egy éles átmenet figyelhető meg a rendezett és folyadék örvényfázisok között.

Résztvevők: 5 kutató, valamennyien az SZFKI munkatársai. Anyagi ráfordítás: 28 M Ft költségvetési támogatás, 3,5 M Ft hazai pályázatok.

Fémfizika: Különböző hidrogén tartalmú Pd-H és Pd<sub>1-x</sub>Ag<sub>x</sub>H rendszereken értelmezték az NMR spektrumkiszélesedés homogén és inhomogén járulékait a 2,4 K-ig végzett NMR szabad precessziós jel és spin-echo mérések alapján. Megállapították, hogy nagyobb H koncentrációk esetén az irodalomban elfogadott homogén dipólus-dipólus járulék jól írja le a spektrum momentumait, kis hidrogén koncentráció esetén viszont a szennyezések (feltehetően Fe) inhomogén járuléka nem elhanyagolható.

Eredetileg rendezetlen (nem feltekeredett) fehérjék és referenciaként globuláris fehérjék vizes oldatai hidratációjának vizsgálatát az itt kidolgozott új NMR és DSC módszerek alapján további fehérjékre terjesztették ki (pl.  $\beta$ -kazein, DF31,  $\alpha$ -szinuklein), meghatározva a hidratburok nagyságát, heterogenitását és dinamikai jellemzőit, az utóbbit NMR relaxációs idő mérések alapján. A kidolgozott módszereket alapjait és az első eredményeket könyvfejezet formájában foglalták össze.

Az elektrokémiai leválasztással kapcsolatos kutatások során palládium és réz együttleválására vonatkozóan igazolták, hogy a leválás akkumulatív előleválásként jellemezhető. A kapott ötvözetek összetételének elemzésével kimutatták, hogy a Pd-Cu ötvözetek összetétele monoton módon változik az elektródpotenciállal. Voltametriás és szimultán kvarcristály-mikromérleg adatokkal igazolták, hogy palládium jelenlétében a réz leválása már az előleválási tartományban bekövetkezik.

Új, *visszacsatolt működési módot* dolgoztak ki elektrokémiai leválasztáshoz. Potenciosztát és elektrokémiai kvarcristály-mikromérleg segítségével olyan üzemeltetési módot valósítottak meg, amelynek során a kapott bevonat összetétele a leválás során, in situ meghatározható, és a leválási folyamat azonnal befolyásolható a kívánt bevonat-összetétel elérése érdekében.

Résztvevők: 6 kutató, valamennyien az SZFKI munkatársai. Anyagi ráfordítás: 33,6 M Ft költségvetési támogatás, 7,3 M Ft hazai pályázatok.

#### *Fémtechnológia és mágnesség*

A fémtechnológiai kutatások keretében az Al alapú ötvözetek ( $Al_{85}Mm_5Ni_8Co_2$ ) gázporlasztási technológiáját dolgozták ki részben amorf, részben nanokristályos porok gyártására. Melegsajtolás után a korong alakú mintákat minősítették XRD, sűrűség, és keménység mérésekkel. Irodalmi összefoglalót publikáltak a Cu alapú ötvözetek üvegeképző hajlamáról és a kapott eredményeket kísérleti mintákkal  $Cu_{100-x-y-z}Zr_xTi_yAg_z$ ,  $Cu_{100-x-y}Mm_xAl_y$  (Mm = Mischmetal) tesztelték. Módszert dolgoztak ki különböző kvázi-DC mágnesezési görbék felvételére, úgy hogy a mágneses tér változását állandó értéken tartották. Az irodalomban elsőként mérték ki mágnesezen ultralágy nanokristályos anyagokon az elsőrendű visszatérési görbét (FORC), az előfeszített első mágnesezési görbét (BFMC) és ezen görbék vegyes kétszeri deriváltjából Preisach eloszlásokat határoztak meg.

Résztvevők: 4 kutató, valamennyien az SZFKI munkatársai. Anyagi ráfordítás: 16,8 M Ft költségvetési támogatás, 1,1 M Ft hazai pályázatok.

#### *Folyadékkristályok*

Új kémiai felépítésű, szimmetrikus, ill. aszimmetrikus harang alakú folyadékkristály molekulákat állítottak elő. Hőmérséklet, frekvencia és/vagy feszültség változtatásával átmenetet hoztak létre egy nematikus folyadékkristályban a szokásos és az un. nemstandard elektrokonvekciós mintázatok között. Meghatározták ez utóbbi mintázattípus főbb jellemzőit. Megmutatták, hogy nemstandard elektrokonvekció esetén is létezhetnek haladó hullámok. A nemstandard elektrokonvekció fellépését a flexoelektromosság segítségével értelmezték.

Meghatározták a direktor csúszás mértékét és jellemzőit gumiarábikummal, ill. glükózzal bevont felületeken.

Analizálták a lejtőn lefolyó szemcsés anyagok folyási sebessége, rétegvastagsága és a lejtő szöge közötti összefüggést. A megfigyelések pontosabb leírhatósága érdekében javasolták a Pouliken szabály kis korrekcióját.

A fenti kutatások a jelenségek mélyebb megértését szolgálják, az új anyagok előállításával kapcsolatos eredmények potenciális alkalmazási lehetőséget hordozhatnak.

Résztvevők: 40 kutató, ebből 7 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 39,2 M Ft költségvetési támogatás, 6,5 M Ft hazai pályázatok, 138 e€ nemzetközi pályázatok.

#### *Neutronspektroszkópia kondenzált anyagokban*

A Reverse Monte Carlo (RMC) módszer segítségével felderítették a szén-dioxid különböző rendezetlen (folyadék, illetve szuperkritikus fluid) fázisainak szerkezetét. Polarizált neutronokkal elvégzett neutrodiffrakciós kísérletekkel meghatározták több különböző összetételű H<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>O elegy (kémiailag: tiszta víz) statikus szerkezeti függvényét. Rubídium-klorid vizes oldatait röntgen- és neutrodiffrakciós módszerekkel vizsgálva, RMC modellezés segítségével megállapították, hogy míg a kationnak jól meghatározott hidrátburka van, a kloridion környezete kevésbé állandó és a vízmolekulák orientációja az anion körül már-már véletlenszerű. A DVD-technológiában felhasznált Ge<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>Te<sub>5</sub> amorf ötvözet szerkezetét 2 diffrakciós és 3 EXAFS kísérleten alapuló RMC modellezéssel tanulmányozták. Az irodalomban fellelhető elképzelésekkel szemben megmutatták, hogy mindhárom alkotóra teljesül a '8-N' szabály. Radioaktív hulladékok tárolására alkalmas többkomponensű boroszilikát-üvegeket vizsgáltak nagyfelbontású neutrodiffrakcióval, majd az azt követő RMC modellezéssel, melynek eredményeképpen két különféle bór-környezetet találtak (BO<sub>3</sub> illetve BO<sub>4</sub> egységekkel). Speciális acéltartályok szerkezeti paramétereit, majd a tartályok anyagában fellépő belső feszültséget határozták meg a szuperkritikus állapotban levő vízre jellemző termodinamikai paraméterek (221 bar, 750 K) mellett.

A boroszilikátok szerkezetével, a DVD-alapanyaggal és a belső feszültség/textúra meghatározásával kapcsolatos eredmények a későbbiekben gazdaságilag is hasznosulhatnak.

Résztvevők: 16 kutató, ebből 10 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 56,0 M Ft költségvetési támogatás, 4,8 M Ft hazai pályázatok, 25 e€ nemzetközi pályázatok.

#### *Neutronszórás*

Neutronspektroszkópiai módszerekkel különféle komplex anyagok molekuláris, illetve nanoszerkezetű tulajdonságait kutatták. Az egyik kutatási terület az alkoholok vizes oldatainak viselkedése volt. Ezeknek az oldatoknak igen nagy szerepe van az élő anyagban lejátszódó biokémiai folyamatokban. A különböző szénhidrogénlánc hosszúságú alkohol molekulák 1–25% közötti koncentrációjú vizes oldatokban szabadon mozognak, ill. összetapadva nagyobb egységeket, aggregátumokat alkothatnak. Az aggregáció jelentősen befolyásolhatja az élettani funkciókat. A kisszögű neutronszórás ezeknek a nanométer skálájú objektumoknak a szerkezeti felépítésére ad információt, a vizsgálatokat változó hőmérsékleti és koncentráció viszonyok esetén végezték. A neutronokkal végezhető roncsolásmentes anyagvizsgáló eljárásoknak fontos szerepe van ipari komponensek élettartam hosszabbításában. Ilyen vizsgálatokat végeztek nukleáris reaktor teljesítmény-szabályzó rúdjaiban. Az intenzív neutron és gamma sugárzási térben a szabályzórud alumínium ötvözetből készült burkolata erős sugárkárosodási és korróziós hatásnak van kitéve. Neutronszórással a használati élettartam szempontjából igen lényeges kezdeti károsodást lehet felmérni a nanométeres skálán jelentkező anyaghibák (üregek és kiválások) alapján.

Résztvevők: 43 kutató, ebből 15 az intézet munkatársa. Anyagi ráfordítás: 84 M Ft költségvetési támogatás, 4,1 M Ft hazai pályázatok, 69 e€ nemzetközi pályázatok.

### *Lézerfény és szilárd anyag – főként nemlineáris – kölcsönhatásai*

**Elméletek:** Saját elméleti modelljük segítségével előre jelezték a felületi plazmonok bomlása során a keltő lézerfénytől nemlineárisan függő emittált fény térbeli eloszlásában jelentkező éles iránymaximumot, valamint e fény kvantumstatisztikai tulajdonságait. Megadták az egyfotonos kísérletekben észlelhető kvantum-, ill. klasszikus korrelációk egységes leírását. Új módszert dolgoztak ki extrém rövid fotoelektron-impulzusuk térbeli, időbeli és spektrális alakítására, mely az ultrarövid fázisstabilizált lézerimpulzusokkal és felületi plazmonokkal való kölcsönhatáson alapul, így az elektronimpulzusokkal végzendő kísérletekhez egyedülálló módszert kaptak. Előre jelezték a lézerrel keltett fotoelektronok de Broglie-hullámainak interferenciája révén keletkező attoszekundumos ( $10^{-18}$  s) időtartamú elektronimpulzusok előállításának lehetőségét. A kvantum-informatikában kulcsfontosságú elektron-foton összefonódottság általuk felfedezett típusának leírását végezték el.

**Kísérletek:** Unikális titán-zafír lézeroszcillátor rendszert építettek, mellyel felületi plazmonokat keltve e lézerénél négy nagyságrenddel magasabb, igen intenzív fénysugárzást nyertek. Ennek segítségével a lézerindukált plazmonok dinamikájában új jelenségeket tártak fel: a plazmonbomlás lézerintenzitással nemlineárisan változó fényének irányeloszlásában éles maximumot találtak és kimérték e fény igen széles spektrumát továbbá klasszikus és kvantumstatisztikai paramétereit, elméleti munkáikban ismertetett előrejelzéseikkel összhangban.

Résztvevők: 6 kutató valamennyien az SZFKI munkatársai. Anyagi ráfordítás: 33,6 M Ft költségvetési támogatás, 5,6 M Ft hazai pályázatok.

### *Gázlézerek és gázkisülések*

Az MTA MFA-val kooperálva, GVOP támogatással befejezték egy új típusú optikai reflektométer kifejlesztését. Atmoszférikus nyomású kisülésben (ELCAD), a mért adatokból meghatározták az elektronok és a pozitív ionok sűrűségét a kisülés különböző helyein. Igazolták a kisülés “negatív fény” nevű tartományában a közel termikus elektronpopuláció jelenlétét. Erősen csatolt szimpla és kettős rétegek tanulmányozása során fény derült a rendszerek dinamikus (hullámterjedéssel kapcsolatos) és olvadási tulajdonságainak részleteire. Kísérleti berendezést állítottak össze a plazmakristályok megfigyelése céljából. Ezzel a kísérlettel a számítógépes szimulációk terén elért eredményeiket kívánják igazolni.

Résztvevők: 11 kutató, ebből 9 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 50,4 M Ft költségvetési támogatás, 10,6 M Ft hazai pályázatok, 48 e€ nemzetközi pályázatok.

### *Lézeralkalmazások, amorf vékonyrétegek*

**Optikai mérés technika:** Optimalizálták az új elven működő előre programozott fotonszámú kvantum-optikai fényforrás optikai paramétereit és generálási statisztikáját. Megvizsgálták a létrehozott eszköz alkalmazási lehetőségeit a kvantumoptikai mérés technikában. Megmérték a felületi plazmonok időbeli statisztikai paramétereit kis és nagy gerjesztő intenzitások esetén, elemezték a gerjesztési és rekombinációs folyamatok linearitását. Továbbfejlesztették a mobil környezetvédelmi laboratórium műszerparkját. Az általuk kifejlesztett kéthullámhosszú négydetektoros aeroszol spektrométert összemérték az amerikai TSI cég műszereivel és a mérési eredmények alapján átalakítottak néhány részegységet. Létrehoztak egy új elven működő gyors (25 ps-os) fotonkorrelátort, amely számos mérés technikai területen alkalmazható. Az általuk megvalósított fejlesztés új távlatokat nyitott az on-line, in-situ és érintésmentes fotonkorrelációs mérés technika területén. A berendezés érzékenysége, az

alkalmazott kvantum limitált detektálás és legmodernebb DSP (digital signal processor) vezérelt adatfeldolgozás következtében 1 nagyságrenddel növelte az érzékenységi küszöböt és így az 50–400 nm méretű részecskék méretének és sebességének meghatározására nyílik lehetőség. Folytatták a korábban elméletileg kidolgozott eljárás alkalmazását az aeroszol minta fő statisztikus jellemzőinek kiértékelésére egy megfelelően kiválasztott lézer impulzus sorozatra adott szórt impulzussor amplitúdó és idő-amplitúdó eloszlásának mérésével. A projekt keretén belül olyan új, komplex többsatornás mérésadatgyűjtő és kiértékelő rendszert hoztak létre, amely alkalmas az amplitúdó-, és az időinformáció egyidejű feldolgozására

Amorf szén vékonyrétegek: 60–2250 nm rétegvastagságú lágy a-C:H filmekben egy sor új jelenséget vizsgáltak meg. Releváns különbségeket figyeltek meg a beteg és egészséges biológiai minták Raman spektrumaiban. Folytatták a koszorúér-tágító sztentek bio-, és haemokompatibilitásának vizsgálatát és védőréteggel történő DLC bevonását. Erre a célra egy célberendezést hoztak létre. Vizsgálták az új DLC bevonatok homogenitását, öregedési tulajdonságait a kompaktság és a felülethez való tapadás tekintetében.

Résztvevők: 16 kutató, valamennyien az SZFKI munkatársai. Anyagi ráfordítás: 89,6 M Ft költségvetési támogatás, 43,5 M Ft hazai pályázatok.

#### *Femtosekundumos lézertechnika és optikai vékonyrétegek*

Az optikai vékonyréteg-analógia alapján egydimenziós analitikus módszert dolgoztak ki fotonikus kristály optikai szerkezetek modellezésére, tervezésére. A Furukawa Electronic Technológia Intézet (FETI) munkatársainak segítségével az egy dimenziós modell alapján kapott eredményeiket összehasonlították a lényegesen számításigényesebb, végeelem módszeren alapuló 2D modell eredményeivel. Azt találták, hogy a modellparaméterek (effektív törésmutató profil, effektív „kritikus beesési szög” stb.) megfelelő megválasztása esetén az 1D modell megfelelő pontosan írja le a fotonikus kristályok spektrális tulajdonságait, és a hullámvezetésből adódó diszperziót leszámítva megfelelően írja le az adott szerkezet alapvető diszperziós tulajdonságait. A módszert eredményesen alkalmazták mind szélessávú, üreges szerkezetű fotonikus kristály szálak tervezésére, mind üreges Bragg szálak diszperziós tulajdonságainak módosítására. Az így megtervezett szálak előnyösen alkalmazhatóak mind a most elterjedten használt, széles sávban hangolható femtosekundumos fényforrásokot alkalmazó mérőberendezések (pl. kétfotonos gerjesztésen alapuló mikro-endoszkópok esetében), mind a femtosekundumos lézerforrások új generációját jelentő femtosekundumos szállézők és szálerősítők esetében. Jelenleg ez utóbbi technológián alapuló femtosekundumos lézer fényforrások fejlesztésén az SZFKI, a R&D Ultrafast Lasers Kft és a Furukawa Electronic Technológiai Intézet alkotta ipari konzorcium dolgozik.

Nanoszkópikus fém- és/vagy dielektrikum rétegeket tartalmazó nagy sáv szélességű és kis diszperziójú antireflexiós bevonatokat, nyalábosztó bevonatokat, dikroikus tükröket, kicsatoló tükröket és spektrális szűrőket állítottak elő femtosekundumos időtartományú lézeroptikai alkalmazásokhoz. A femtosekundumos lézertechnológiában alkalmazható nagy sáv szélességű és kis diszperziójú frontpolarizátor bevonatokat fejlesztettek ki a spektrum UV, VIS és IR tartományaira. Új típusú trikroikus polarizációs osztóbevonatot fejlesztettek ki a spektrum látható tartományára, amellyel jó hatásfokkal választhatók szét a merőleges polarizációs komponensek egyidejűleg három diszkrét hullámhossz sávban (kék, zöld, piros), 45 fokos fénybeesésénél. Az új trikroikus polarizátor bevonat elsősorban háromdimenziós információ-megjelenítési technológiákban alkalmazható.



Résztvevők: 6 kutató, ebből 5 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 22,4 M Ft költségvetési támogatás, 10,0 M Ft hazai pályázatok.

#### *Optikai egykristályok növesztése és minősítése*

YAl<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>:Ho (YAB) kristályokat magvezérelt flux módszerrel növesztettek, amelyekben nagyfelbontású (0,01cm<sup>-1</sup>) Fourier transzformációs spektroszkópiával és kristálytér számításokkal meghatározták a Ho<sup>3+</sup>-ionok teljes term diagramját. A homogén, egy rácshelyre történt adalék beépülés, a kristály minősége, és a környezet megfelelő szimmetriája lehetővé tette a <sup>165</sup>Ho izotóp 7/2 magspinjétől eredő optikai finomszerkezet (OHF) detektálását, ami korábban az irodalomban csak három optikai anyagon sikerült. A nyolc átmenetnél megfigyelt OHF komponensek száma és a felhasadás mértéke az elméletnek megfelelően függött a kiinduló és gerjesztett állapotok szimmetriájától.

Szilárdfázisú reakcióval előállított K<sub>3</sub>Li<sub>2</sub>Nb<sub>5</sub>O<sub>15</sub> (KLN) kerámia mintákon röntgen-diffrakciós fázisanálízissel meghatározták a szobahőmérsékletű stabilitási tartományt. Meghatározták a monofázisú tartományban eltérő összetételekhez tartozó rácsállandókat, sűrűségeket és Curie hőmérsékleteket. A nem-sztöchiometrikus összetételű anyag hibaszerkezetére modelleket dolgoztak ki.

A LiNbO<sub>3</sub> kristályok összetételének az OH-rezgések komponenseinek intenzitásarányán alapuló meghatározását kiterjesztették ismeretlen termikus előéletű kristályokra. Megállapították, hogy Mg és Y megfelelő koncentrációjú együttes adalékolása elősegíti a periodikusan polarizált LiNbO<sub>3</sub> doménstruktúra reguláris kialakítását az off-centrál Czochralski növesztés során.

Czochralski módszerrel Bi<sub>2</sub>TeO<sub>5</sub>:Yb és Bi<sub>2</sub>TeO<sub>5</sub>:Tm kristályokat növesztettek, és abszorpciós színeképekben azonosították az Yb<sup>3+</sup> és Tm<sup>3+</sup> ionokhoz tartozó átmeneteket. Bi<sub>2</sub>TeO<sub>5</sub>:Tm esetében az <sup>1</sup>G<sub>4</sub> szint élettartama 160 μs volt. Ez a nem alapállapoton végződő átmenet lézer céljára perspektivikus.

Az optikai kristályok vizsgálatára kidolgozott analitikai módszereket nemzetközi környezetvédelmi és műtárgyvédelmi kutatásokban alkalmazták.

Az optikai kristályok alap kutatásában a témaválasztást az alkalmazás lehetőségei motiválták. Kristályukat a hazai és külföldi partnerek jelenleg is használják eszközfejlesztésekre.

Résztvevők: 32 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 44,8 M Ft költségvetési támogatás, 3,5 M Ft hazai pályázatok és 4 M Ft egyéb bevétel.

#### *Optikai kristályok karakterizációja és hibahelyeinek vizsgálata*

Pásztázó elektronmikroszkópos energiadiszipatív röntgenspektrometriás vizsgálatokkal meghatározták a kálium trimolibdát olvadék-oldatból növesztett YAB egykristályok benőtt hibáinak kialakulásában domináns szennyező elemeket (Mo, K, Si, Ti és Ca). A LiNbO<sub>3</sub> kristályrácspotenciálok felhasználásával meghatározták a különböző lehetséges intrinszik és extrinszik hibák kialakulási energiáit, amely a kísérletekkel összhangban Li vakanciák jelenlétét valószínűsíti a rácspan. Hőkezelési módszert dolgoztak ki a LiNbO<sub>3</sub> homogén dehidratálására, mellyel két nagyságrenddel csökkentették a kristály hidrogéntartalmát. Új módszert dolgoztak ki a teljes interferenciaképre történő fázismodulált csíkrendszer illesztésével a LiNbO<sub>3</sub>:Fe kristályokba írt hologramok interferencia-mikroszkópos képeinek feldolgozására. Ferroelektromos KLN-1 kristályokban meghatározták az OH dipólok irányát a

krisztallográfiai tengelyekhez képest. Korrelációt figyeltek meg a kristályok növesztési tengelye mentén mért Nb tartalom, valamint az OH sávok és Raman spektrumok változása között. A szövet-ekvivalens termolumineszcens doziméterként alkalmazható lítium tetraborátban EPR és emissziós spektroszkópiai módszerekkel jellemezték a  $\text{Cu}^+$  és  $\text{Cu}^{2+}$  ionok beépülését a sugárzás hatására létrejövő töltésátviteli folyamatok megértésére. Számos vizsgálati módszer együttes eredményéből megállapították, hogy az erbiummal adalékolt tellurit üveg mintákba ionimplantálással írt sík hullámvezetők ún. gát típusúak, azaz az implantált ionok elnyelődése törésmutató csökkenést okozott a rétegben.

Résztvevők: 24 kutató, ebből 9 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 50,4 M Ft költségvetési támogatás, 8,2 M Ft hazai pályázatok.

### *Nemlineáris és kvantumoptika*

Megalkották a kiegyensúlyozott kvantumos bolyongás visszatérési valószínűségének (Pólya-szám)  $d$  dimenziós általánosítását. Levezettek egy elégséges feltételt annak eldöntésére, hogy egy kvantumos bolyongó vissza tér-e a kiindulási helyre. A levezetés mellékterméke egy egyszerű kritérium a kvantumos bolyongás lokalizációjára. Sokrészecskés kvantumrendszerek összefonódottságának kísérleti kimutatására használható általánosított spin-összenyomás egyenlőtlenségek teljes rendszerét dolgozták ki, amelyek segítségével nincs szükség a részecskéken egyenként végrehajtott mérésekre. Részt vettek egy – a Max Planck Institute for Quantum Optics intézetben sikerrel végrehajtott – kísérletben, amelynek során az általuk kidolgozott elven mérték kísérletileg a négy qubitet megvalósító fotonikus rendszer összefonódottságát. Kidolgoztak egy új módszert semleges atomok termikus mozgásának hűtésére, amely az elektromágneses sugárzási tér módus-sűrűségének az optikai hullámvezetők gerjesztett ágainak küszöbénél található szingularitásán, az ún. „geometriai rezonancián” alapszik. A javasolt módszer hatékonysága a korábban kidolgozott és már demonstrált rezonátoros hűtésével vetekszik, ugyanakkor optikai szálak alkalmazása lényegesen flexibilisebb és egyszerűbb, továbbá molekulák hűtésére is alkalmazható.

Résztvevők: 49 kutató, ebből 14 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 78,4 M Ft költségvetési támogatás, 17,2 M Ft hazai pályázatok.

### *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 előállítására és vizsgálata, a lézerek mérés-technikai alkalmazásai, valamint az optikai kristályok előállítására és vizsgálata. Perspektivikus hasznukat jelzi a számos EU-, ill. NKFP projektben való részvétel. Néhány intézeti fejlesztésű eszköz, ill. anyag (speciális lézertükrök, lézeres részecskeszámlálók, nemlineáris optikai kristályok, lágymágneses anyagok) már jelenleg is számos hazai területen felhasználásra került. Különleges optikai egykristályokat szállított az intézet a BME Atomfizikai Tanszékének, a Szegedi Egyetem Optikai és Kvantumelektronikai Tanszékének, a Massachusetts Institute of Technology-nak (Cambridge, USA), a Westfälische Wilhelms Universität-nek (Münster, D), továbbá egy francia vállalatnak.

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*

Az intézet kutatásai során széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésre támaszkodnak. Történelmi előzmények, tematikai hasonlóságok és a közös infrastruktúra használata folytán legszorosabb kapcsolatai a csillebérci telephelyen működő akadémiai intézetekkel vannak. Mindez számos témában tudományos együttműködést jelent, de hozzá tartozik a közös elhelyezésből adódó feladatok teljesítése is. 2007. január 1-jén az intézet tulajdonába került a megszűnt MTA KFKI Telephelykezelő könyvtári állománya. Az intézet feladata lett a telephelyen működő akadémiai intézetek és más szervezetek könyvtári igényeinek kielégítése, a közös könyvtár működtetése.

Az intézet 5 NKTH pályázat megvalósításán dolgozott különböző konzorciumok tagjaként, főleg lézeralkalmazási témákban. A konzorciumi tagok között voltak akadémiai intézetek (Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézet, Szegedi Biológiai Központ, SZTAKI, MFA, KFKI-AEKI, ATOMKI), egyetemi tanszékek (a BME-ről, a Szegedi, illetve a Pécsi Tudományegyetemről, a veszprémi Pannon Egyetemről), országos hatókörű intézmények (Országos Meteorológiai Intézet, Fodor J. Országis Közegészségügyi Központ), K+F-ben érdekelt vállalatok (Technorg-Linda Kft, FURUKAWA Electric Techn. Int. Kft, VIDEOTON Holding Zrt, CVI Gyógyító, Kutató és Oktató Kft) és kis spin-off cégek (R&D Ultrafast Lasers Kft, OPTILAB Műszaki Fejl. Szolg. Kft).

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézetnek a kutatás minden területén élő és szoros kapcsolatai vannak európai és amerikai egyetemekkel és kutatóintézetekkel. A 2007-ben megjelent idegen nyelvű publikációk 2/3-ában legalább az egyik társszerző külföldi. Az intézet munkatársai nemzetközi rendezvényeken 126 tudományos előadást tartottak és 87 posztert mutattak be. Különösen eredményes volt a svéd egyetemekkel folytatott együttműködés az elektronszerkezet kutatása terén: a közös munka eredményei 11 publikációban jelentek meg.

A kapcsolattartás formái közé tartoztak a rövid idejű látogatások, a hosszabb idejű külföldi ösztöndíjak és munkavállalások, vendégkutatók fogadása, továbbá közös workshopok és iskolák szervezése.

A hosszabb idejű tartózkodások különösen a fiatal kutatók szakmai fejlődése, nemzetközi kapcsolataik építése szempontjából fontosak. A kutatók külföldi munkavállalása az előző évéhez hasonlóan alakult. 12 kutató töltött összesen 92 hónapot külföldön, közülük öten legalább egy évet. Az intézet számára megtiszteltetés, hogy egyik munkatársa teljes professzori állásra (Professor in Solidification) kapott meghívást a Brunel University (West London), UK, Brunel Centre for Advanced Solidification Technology nevű kutatóintézetébe, egy évre, ahol folytatja a nukleációs folyamatok elméleti vizsgálatát ill. a számítógépes anyagtudomány területén eddig végzett kutatásait.

Az intézetben hat külföldi vendégkutató összesen hét hónapot dolgozott. Az időtartam jelentős csökkenést mutat a 2006. évi 21 hónaphoz képest.

Az intézet az év folyamán szűkebb körű rendezvényeket szervezett a következő kutatási témák, illetve együttműködések aktuális kérdéseiről: *Electrochemistry Seminar* (magyar-román Tét együttműködés), *Workshop on Neutron Instrumentation* (a moszkvai Kurcsatov Intézettel folytatott együttműködés), továbbá *Progress Meeting* (a NEURONANO EU FP6-os projekt).

Az intézet kutatói számos mobilitás típusú tematikus nemzetközi együttműködésben vettek részt. Az MTA egyezményen alapuló kétoldalú tematikus együttműködések elsősorban az akadémiai intézettekkel való kapcsolattartást teszik lehetővé. Ezek keretében 13 ország 29 *kutatócsoportjával* folytattak közös kutatásokat. A témák nagy része a korábbi közös munkák folytatása.

A Tét együttműködések elsősorban a külföldi egyetemekkel közösen folytatott kutatásokat segítették elő, de hasznosnak bizonyultak a felsőoktatási tevékenység szempontjából is. 2007-ben Tét megállapodások keretében 8 ország 12 *kutatócsoportjával* folytak közös kutatások.

OTKA témában (Fémfelületeken lézerrel keltett ultragyors folyamatok vizsgálata) az intézet kutatói kétoldalú együttműködést folytattak a német Max-Planck-Institut für Quantenoptik (Garching) intézettel. A pályázat támogatásával egy hosszú rezonátoros Ti:zafír lézert telepítettek a német partnerintézetből Budapestre. Ugyanezzel az intézettel közös kutatásokat végeztek ultragyors fény-anyag kölcsönhatások elméleti vizsgálata terén.

A Service de Physique de l'État Condensé (CEA-Saclay, Franciaország) laboratóriummal az elektronkristályok és a nanoelektronika területén folytattak közös kutatásokat. Próbaüzemet végeztek a millikelvines hőmérséklettartományban működő mikrohullámú spektrométerrel és azt találták, hogy a berendezéssel jóval kedvezőbb jel/zaj viszony érhető el, mint a kereskedelemben kapható hasonló készülékeknél.

### *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). Igen szoros a kapcsolat az ELTE TTK-n folyó fizikus- és a BME-n folyó mérnök-fizikus képzéssel, továbbá a PTE Fizikai Intézetével, melynek igazgatója az intézet egyik vezető kutatója, aki munkatársaival együtt jelentős részt vállal az elméleti fizika és az informatika pécsi oktatásában.

2007-ben az intézet 53 kutatója vett részt az egyetemi oktatásban, összesen 2681 oktatási órában rendes és speciális előadások tartása, továbbá szemináriumok és laborgyakorlatok vezetése formájában. Az intézetben 6 diplomamunka készült el, 2 akadémiai doktori és 8 doktori (PhD) disszertációt védtek meg, 31 doktori ösztöndíjas dolgozott disszertációjának elkészítésén.

Az intézet rendszeresen fogad külföldi egyetemi hallgatókat és doktorandusokat rövidebb időre, különösen a folyadék-kristályok, az optikai egykristályok és a neutronspektroszkópiai kutatások területén.

Az intézet regionális jelentőségű szerepet játszik a neutronfizikai kutatásokkal foglalkozó fiatal kutatók képzésében. 2007-ben az intézet Neutronspektroszkópiai Osztálya egyhetes iskolát rendezett a neutronszórás témakörében a mérés-technika és a kapcsolódó berendezések megismertetése céljából. Az iskolán 22 fiatal munkatárs vett részt Európa 10 országából.

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatások anyagi fedezetét – az alapellátáson túlmenően – 2007-ben is a korábban elnyert hazai és nemzetközi pályázatok biztosították. A pályázatok szerződésállománya összesen mintegy 375 M Ft-ot tett ki, mely összeg legnagyobb hányadát (37%) a nemzetközi pályázatok alkották. Ezt követik az OTKA (36%) és az egyéb (főleg NKTH) pályázatok (27%).

A nemzetközi projektek zöme az EU 6. Keretprogramjához kapcsolódott. A 2007-ben indult 7. Keretprogram első pályázati felhívásaiban eddig négy pályázat volt eredményes. Közülük külön említést érdemel két olyan sok-résztvevős projekt, mely egy-egy európai nagyberendezés létrehozásának előkészítésére irányul (*Preparatory activities for the implementation of the European X-ray free electron laser facility*, továbbá *Extreme light infrastructure preparatory phase*).

Az intézet egyik kutatócsoportja nemzetközileg elismert kutatásokat folytat fémolvadékoknak különböző körülmények között történő megszilárdulásának leírására. Az Európai Űrkutatási Ügynökség (European Space Agency) 2007-ben három téma kidolgozására adott megbízást.

A hazai pályázatok közül 4 NKFP és 4 GVOP projekt zárult le 2007-ben. A zárójelentések elkészültek, jelenleg azok elbírálása folyik. Az év folyamán sajnos nem volt olyan pályázati felhívás, mely az intézet profiljába tartozott, így nem történt új projekt indítása.

A fenti kieséseket csak részben pótolták az OTKA pályázatok. 2007-ben az intézet munkatársainak 11 pályázatát fogadták el. Közülük három valósul meg OTKA–NKTH közös támogatással (*Lokális szerkezetvizsgáló módszerek fejlesztése és alkalmazása, Redukált dimenziójú szerkezetek mágneses anizotropiájának kutatása*, továbbá *Szén nanoszerkezetek kísérleti és elméleti vizsgálata*). Az intézet munkatársai 2007-ben 50 OTKA projekt megvalósításán dolgoztak, ezek éves szerződésállománya összesen 134 M Ft volt.

2007-ben az intézet összesen 19,7 M Ft költségvetési támogatást kapott az akadémiai *Elnöki Keretből*, négyféle célból:

- A társadalmi, gazdasági hasznosulást, versenyképességet növelő keretből 8 M Ft támogatásban részesült az *Új mérési elven működő aeroszol analízátor kifejlesztése és szabadalmaztatása* nevű projekt.
- A nemzetközi pályázatokban való sikeres részvétel támogatási keretből négy pályázó kapott összesen 1,4 M Ft támogatást 4 benyújtott pályázat előkészítésével kapcsolatos kiadások fedezetére. A FINELUMEN és az ELI pályázatokat az EU elfogadta, mindkét pályázat jelenleg a szerződéskötés szakaszában van. A másik két pályázat (WATERBIONET és az INFORGANICS) nem volt eredményes.
- Korábbi kimagasló eredményeik alapján további 6 kutató részesült összesen 7,8 M Ft támogatásban. Ezt az összeget részben az infrastruktúra fejlesztésére (pl. egy turbomolekuláris szivattyú beszerzésére), informatikai fejlesztésre (szoftvervásárlásra), továbbá kapcsolattartásra (utazásra, meghívásra) fordították. A támogatás egy részét a meglévő EU-s pályázatokkal kapcsolatos, de az EU által nem fedezett kiadásokra fordították.
- Az FP7 ERC pályázaton négy fiatal kutató vett részt, közülük egy jutott túl az elbírálás első lépésőjén. Az elnöki keretből kapott összesen 2,5 M Ft támogatást a pályázatot előkészítő utazás (útiköltség és szállás) fedezetére használták.

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

1. Legeza Ö, Sólyom J, Tincani, L, Noack, RM: Entropic analysis of quantum phase transitions from uniform to spatially inhomogeneous phases, Phys Rev Lett, 99: 087203/1-4 (2007)
2. Penc K, Fouet, JB, Miyahara, S, Tchernyshyov, O, Mila, F: Ising phases of Heisenberg ladders in a magnetic field, Phys Rev Lett, 99: 117201/1-4 (2007)
3. Lin, YC, Iglói F, Rieger, H: Entanglement entropy at infinite randomness fixed points in higher dimensions, Phys Rev Lett, 99: 147202/1-4 (2007)
4. Kunz, H, Livi, R, Sütő A: The structure factor and dynamics of the helix-coil transition, J Stat Mech, P06004/1-22 (2007)
5. Dubrovinsky, L, Dubrovinskaia, N, Narygina, O, Kuznetsov, A, Prakapenka, V, Vitos L, Johansson, B, Mikhaylushkin, AS, Simak, SI, Abrikosov, IA: Experimental evidences for body-centred-cubic phase of iron-nickel alloy in the earth's core, Science, 316: 1880 (2007)
6. Ropo, M, Kokko, K, Punkkinen, MPJ, Hogmark, S, Kollár J, Johansson, B, Vitos, L: Theoretical evidence of the compositional threshold behavior of FeCr surfaces, Phys Rev B, 76: 220401/1-4 (2007)
7. Gránásy L, Pusztai T, Saylor D, Warren JA: Phase field theory of heterogeneous crystal nucleation, Phys Rev Lett, 98: 035703/1-4 (2007)
8. Itkis, ME, Borondics, F, YuA, Haddon, RC: Thermal conductivity measurements of semitransparent single-walled carbon nanotube films by a bolometric technique, Nano Lett, 7: 900–904 (2007)
9. Calucci, L, Forte, C, Fodor-Csorba K, Mennucci, B, Pizzanelli, S: Conformations of banana-shaped molecules studied by  $^2\text{H}$  NMR spectroscopy in liquid crystalline solvents, J Phys Chem B, 111: 53–61 (2007)
10. Buka Á, Éber N, Pesch W, Kramer L: Isotropic and anisotropic electroconvection, Phys Reports, 448: 115–132 (2007)
11. Mankovsky S, Bakonyi I, Ebert H: Magnetic susceptibility contributions and electronic density of states in  $(\text{Ti,Zr})_{100-x}(\text{Ni,Cu})_x$  metallic glasses and crystalline compounds, Phys Rev B, 76, 184405/1-15, 2007
12. Péter L, Pádár J, Tóth-Kádár E, Cziráki Á, Sóki P, Pogány L, Bakonyi I: Electrodeposition of Co-Ni-Cu/Cu multilayers 1. Composition, structure and magnetotransport properties, Electrochim Acta, 52: 3813–3821 (2007)
13. Varga LK: Soft magnetic nanocomposites for high frequency and high temperature applications, J Magn Magn Mater, 316: 442–447 (2007)
14. Székely NK, Almásy L, Rădulescu, A, Rosta L: SANS Study of aqueous solutions of pentanediol and hexanediol, J Appl Cryst, 40: s307–s311 (2007)

15. Jóvári P , Kaban, I, Steiner, J, Beuneu, B, Schöps, A, Webb, A: 'Wrong bonds' in sputtered amorphous Ge<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>Te<sub>5</sub>, J Phys: Condens Matter, 19: 335212/1-9 (2007)
16. Dombi P, Antal P: Investigation of a 200-nJ chirped-pulse Ti:sapphire oscillator for white light generation, Laser Phys Lett, 4: 538–542 (2007)
17. Donkó Z, Golden KI: Collective excitations in electron-hole bilayers; Phys Rev Lett, 98: 236801/1-4 (2007)
18. Veres M, Tóth S, Koós M: Grain boundary fine structure of ultrananocrystalline diamond thin films measured by Raman scattering, Appl Phys Lett, 91: 031913/1-3 (2007)
19. Várallyay Z, Fekete J, Bányász Á, Szipőcs R: Optimizing input and output chirps up to the third order for sub-nanojoule, ultra-short pulse compression in small core area PCF, Appl Phys B, 86: 567–572 (2007)
20. Baraldi, A, Capelletti, R, Mazzer, M, Magnani, N, Földvári I, Beregi E: Hyperfine interactions in YAB: Ho<sup>3+</sup>: a high resolution investigation, Phys Rev B, 76: 165130/1-10 (2007)
21. Lengyel K, Kovács L, Péter Á, Polgár K, Corradi G: The effect of stoichiometry and Mg doping on the Raman spectra of LiNbO<sub>3</sub>:Mg crystals, Appl Phys B, 87: 317–322 (2007)
22. Berneschi, S, Conti, GN, Bányász I, Watterich, A, Khanh, NQ, Fried, M, Pászti F, Brenci, M, Pelli, S, Righini, GC: Ion beam irradiated channel waveguides in Er<sup>3+</sup>-doped tellurite glass, Appl Phys Lett, 90: 121136/1-3 (2007)
23. Tóth G, Knapp, C, Gühne, O, Briegel, HJ: Optimal spin squeezing inequalities detect bound entanglement in spin models, Phys Rev Lett, 99: 250405 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	173	Ebből kutató <sup>2</sup> :	115
PhD, kandidátus:	55	MTA doktora:	28
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	2
		rendes tag:	3
			45
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			231
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			225
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	185
nemzetközi együttműködés keretében:	147	SCI által regisztrált folyóiratban:	200
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	481,36	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	3101
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2405
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	2	könyvfejezet:	3
		jegyzet:	3
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	8	MTA doktora:	2
		levelező tag:	1
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	1
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	126	posztterek száma:	87
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	32	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			53
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	30	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	49	Gyakorlati kurzusok száma:	29
TDK munkát készítő hallgatók száma:	9	Diplomamunkát:	14
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	31
			2681
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			862,3 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	16	Teljes saját bevétel:	648,4 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			50
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	134,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			6
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	41,7 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	41 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7,7 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			11
EU forrásból:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	103,6 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	33,8 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	28,4 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			4 MFt



MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI  
TÁMOGATOTT TANSZÉKI KUTATÓHELYEK



## BME ALKALOIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Huszthy Péter, az MTA doktora  
1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.  
Telefon: 463–1071, Fax: 463–3297  
e-mail: huszthy@mail.bme.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Fő feladatuk a biológiailag és gyógyászatilag is hatékony anyagok szintézise. Vizsgálják a vindolin aromás gyűrűjének és a 16-os észter-csoportnak a reakciókészségét abból a célból, hogy új funkciós csoportok kialakításával további citosztatikus hatású származékok előállítására legyen lehetőség. A korábban már kidolgozott modell-szintézis alapján vizsgálják az Alzheimer-kór kezelésében alkalmazott galanthamin előállítását. Szintetizálják a fizosztigmin alkaloid karba-analagonjait. Célul tűzték ki biológiailag aktív és várhatóan előnyös terápiás tulajdonságokkal rendelkező indolalkaloidok szintézisét. A korábbiakban az aszpidoszpermán- és a pszeudoaszpidoszpermán-vázis alkaloidok felépítésére kidolgozott konvergens (és biomimetikus) szintézisstratégiát kívánják kiterjeszteni más, az említettekkel rokon alkaloidok fölépítésére. Tervezték farmakológiailag hatásos többgyűrűs N-heterociklusok pl. kinolinok és izokinolinok, illetve új szerotonin antagonisták előállítását. Biokatalizátorokat kívántak alkalmazni enantiomertiszta szintézisintermedierek előállítására és élelmiszeripari/takarmányipari alkalmazásokhoz. Új biokatalizátorok fejlesztését tervezték modern enzimműködési technikák továbbfejlesztésével és mikrobiális szűrések segítségével.

Tervbe vették olyan piridin, ill. akridin egységet tartalmazó enantiomertiszta koronaéter származékok szintézisét, amelyek kovalens kötésekkel szilikagélhez rögzíthetők, és az így kapott királis állófázisokon racém aminok, aminosavak és származékaik jó hatásfokkal rezolválhatók a biológiai szempontból jelentős enantiomeregységes termékekké.

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

A kutatócsoport által kidolgozott és a Richter Gedeon Nyrt. által ipari méretekre nagyított szintézissel gyártott és forgalmazott két készítmény, a Cavinton (mintegy 18 milliárd Ft) és a Fluconazol (mintegy 4 milliárd Ft) forgalmi értéke 2007-ben együttesen mintegy 22 milliárd Ft volt. Mindkét eljárás számos szabadalommal védett, amelyekben a kutatócsoport tagjai nevesítve találhatók.

Kiemelkedő eredményeket értek el az indolvázis-, és más szerkezetű, jelentős élettani hatással rendelkező alkaloidok és alkaloidszerű vegyületek szintézisében. Új módszereket dolgoztak ki a gyógyászatilag fontosnak ígérkező anyagok szintézisére. A 10-bróm-vindolin nitrálásakor kimutatták a Reverdin-reakciót és azonosították az ennek során kapott anomális terméket. A 16-os helyzetben aminosav-észterrel kapcsolt vindolinokon karboxilcsoportot alakítottak ki ezek oligopeptidekhez történő kötése céljából. A konjugált származékok jelentős citosztatikus hatást mutattak. *5 fő, ebből 1,3 kut.csop. tag. Pályázati forrás: 425 E Ft (OTKA).*

Két metoxicsoporttal helyettesített tetralon-származékból kiindulva eljutottak a megfelelő benzo[c]azepinhez, mely az egyik fontos kulcsintermediér a galanthamin szintézisében. *4 fő, ebből 1,3 kut.csop. tag. Pályázati forrás: 400 E Ft (OTKA).*

Kiemelkedő eredményeket értek el a pseudoaszpidosperma családba tartozó, öttagú D-gyűrűt tartalmazó ibofillidin alkaloidok előállítására. Racionális szintézisutat dolgoztak ki a csoport névadó alkaloidja és 20-epimerje előállítására. Megvalósították a 18-hidroxi-20-epi-ibofillidin első szintézisét. *2,5 fő, ebből 0,5 kut.csop. tag. Pályázati forrás: 3690 E Ft (OTKA)*

Egyszerű eljárást dolgoztak ki a várhatóan sejtnevekedést gátló hatású új furo[2,3-f]izokinolinok és furo[3,2-f]kinolinok előállítására. Nagyszámú benzotriazin származékot szintetizáltak és vizsgálták fényvédő hatásukat. Eljárásokat dolgoztak ki az 5HT6 szerotonin receptoron ható új szerotonin antagonisták előállítására. Szintetizálták az Alzheimer-kór kezelésére használt fizosztigmin alkaloid karba-analagonjait. *5 fő, ebből 1,8 kut.csop. tag. Pályázati forrás: 3700 E Ft (NKFP)*

Új szterin észteráz aktivitású biokatalizátorokat állítottak elő élelmiszer minőségű mikroorganizmusok szilárd fázisú fermentációjával. Az így kifejlesztett biokatalizátorokat koleszterinszint-csökkentő hatású növényi szterinészterek előállítására használták fel. Növényi szterinek konjugált linolsav észterének biokompatibilis előállítását oldották meg.

Takarmányozási adalékként vizsgálni kívánt konjugált linolsav észtereket állítottak elő oldószer-mentes, környezetbarát módszerrel lipáz enzimeket alkalmazva.

Vizsgálták a kereskedelmi lipázok módosítását újszerű sol-gel rögzítési módszerek alkalmazásával. Kereskedelmi lipázok felhasználásával megvalósították a *cisz*-[2-(tritoloximetil)ciklopropil]metanol két enantiomerjének nagy enantiomertisztaságú formában történő előállítását. *5 fő, ebből 1 kut. csop. közreműködő. Pályázati forrás: 3400 E Ft (OTKA)*

A kereskedelemről könnyen beszerezhető és viszonylag olcsó alapanyagokból kiindulva többlépéses szintézissel akridin egységet tartalmazó 18-korona-6 éter típusú enantiomertiszta makrociklust állítottak elő, ezt kovalens kötésekkel szférikus HPLC minőségű szilikagélhez rögzítették és az így kapott királis állófázison protonált primer aralkil-aminokat jó határfokkal rezolváltak. Olyan piridin egységet tartalmazó enantiomertiszta koronaéter származékokat állítottak elő, amelyekből várhatóan nagy enantiomer szelektivitással bíró szenzor- és szelektormolekulák fejleszthetők ki. *5 fő, ebből 2 kut. csop. tag. Pályázati forrás: 4900 E Ft (OTKA)*

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Együttműködő partnereik: MTA KK, Richter Gedeon Nyrt., EGIS Nyrt. és a Sanofi-Aventis (Chinoin) Gyógyszergyár. E gyárakkal együttműködve dolgoznak új készítmények kidolgozásán és a már gyártott anyagok gyártástechnológiájának fejlesztésén új kémiai felismeréseiket felhasználva. A citosztatikus hatású vegyületeket Prof. Hudecz Ferenc (MTA-ELTE Peptidkémiai Kut. csop.), és Prof. Kéri György (MTA-SE Peptidbiokémiai Kut. csop.) csoportja vizsgálja. Bábolna Környezetbiológiai Központ: juvenil hormon analogonok és feromonok felhasználása a korszerű környezetkímélő növényvédelemben. ESTEVE és ISDIN (Barcelona, Spanyolország): szerotonin antagonisták, ill. fényvédő anyagok. Bayer CropScience: növényvédőszer. Új biokatalizátorok: BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék és Bunge Zrt. A biokatalizátorok folyamatos üzemű reaktorokban történő alkalmazásainak fejlesztése kapcsán együttműködést alakítottak ki a ThalesNano Zrt munkatársaival. Az enzimmegkötési technikák továbbfejlesztésében a Dept of Organic Chemistry, „Politehnica” University of Timisoara (Románia) kutatócsoportjával működtek együtt. Az ammónia-liáz enzimek tanulmányozása kapcsán szoros együttműködésben voltak a BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi

Tanszékével, Prof. János Rétey (Inst. of Organic Chemistry, Univ. Karlsruhe, Németország) és Dr. Joseph Noel (Howard Hughes Medical Inst., Jack H. Skirball Center for Chemical Biology and Proteomics & The Salk Inst. for Biological Studies, La Jolla, California, USA) kutatócsoportjaival. A koronaéter alapú új királis állófázisok vizsgálatát Prof. Hollósi Miklós munkacsoportjával (ELTE Kémiai Intézet, Szerves Kémia Tanszék) együttműködve végezték. A koronaéter alapú új szenzormolekulák kifejlesztésében szoros együttműködést alakítottak ki Tóth Klára professzorasszony (BME, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék) munkacsoportjával.

A kutatócsoportból 4-en minden félévben kötelező tantárgyakat adnak elő, hárman pedig minden félévben laboratóriumi gyakorlatokat vezetnek.

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A tárgyévben elnyerték az OTKA K-68734 pályázatot. A kb. másfél milliárdos 2007-ben véget ért MEDICHEM2 projekt (NKFP 1A/005/04) résztvevőjeként (3,7 M Ft) kiemelkedően citosztatikus hatású benzofurán és indolvázis vegyületek szintézisében vettek részt. A tárgyévben kiírt Jedlik pályázaton a ThalesNano Zrt vezetésével az NKFP 07 A2 FLOWREAC konzorcium (ThalesNano Zrt, BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, ComerGen Zrt, ComGrid Kft, MOL Nyrt, Pannon Egyetem, Kémia Intézet Szerves Kémia Intézeti Tanszék) 430 MFt ösztámogatást nyert el 2008–2010 időszakra. A kutatócsoport közreműködő tagja témavezetésével és a kutatócsoport egy tagjának részvételével ebből kutatásaikra a 2008-2010 közötti időszakra 75 M Ft támogatás áll rendelkezésre. Az OTKA K-62654 (2006–2009; 19,6 M Ft) pályázat keretében számos új koronaéter alapú szenzor- és szelektormolekulát állítottak elő és sikeresen alkalmazták azokat.

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

1. Moldvai I, Gáts-Baitz E, Temesvári-Major E, Russo L, Pápai I, Rissanen K, Szárics É, Kardos, J, Szántay Cs: Dimerization of (+)-lysergic acid esters, *Heterocycles* 71: 1075-1094 (2007)
2. Gorka-Kereskényi Á, Szabó L, Hazai L, Lengyel M, Szántay Cs, Jr, Sánta Zs, Kalaus Gy, Szántay Cs: Aromatic electrophilic substitutions on vindoline, *Heterocycles* 71: 1553-1563 (2007)
3. Tóth F, Kalaus Gy, Horváth D V, Greiner I, Kajtár-Peredy M, Gömörly Á, Hazai L, Szántay Cs: Synthesis of vinca alkaloids and related compounds. Part 108. Efficient convergent synthetic pathway to the ibophyllidine skeleton IV. First synthesis of (±)-18-hydroxy-20-epiibophyllidine, *Tetrahedron* 63: 7823-7827 (2007)
4. Törincki M, Kolonits P, Pálosi E, Novák, L: Synthesis of furo[2,3-f]isoquinolines by aromatic Claisen rearrangement and subsequent cyclization, *Synthesis*: 284-288 (2007)
5. Péter F, Zarcula C, Kiss C, Csunderlik K, Poppe L: Enhancement of lipases enantioselectivity by entrapment in hydrophobic sol-gel materials: Influence of silane precursors and immobilization parameters, *J Biotechnol* 131S: S109 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	7	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			12
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			11
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	10
nemzetközi együttműködés keretében:	1	SCI által regisztrált folyóiratban:	10
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	16,469	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	176
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			141
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	10	posztterek száma:	5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	5	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	15	Gyakorlati kurzusok száma:	14
TDK munkát készítő hallgatók száma:	10	Diplomamunkát:	7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatók órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	11
			1120
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			34 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	205,6 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,2 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	150 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			10
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	42,4 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## BME ANYAGSZERKEZETI ÉS MODELLEZÉSI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Hargittai István, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Gellért tér 4.  
Telefon: 463-1286, Fax: 463-4052  
E-mail: istvan.hargittai@gmail.com

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Szerves és szervetlen molekulák szerkezeti és rezgési spektroszkópiai vizsgálata. Intelligens anyagok kategóriájába tartozó új típusú kémiai gélek előállítás, szerkezeti és termodinamikai paramétereinek vizsgálata. Új anyagátadási műveletek optimalizáló modelljének és algoritmusának megalkotása, fejlesztése. A sejtműködésben meghatározó fehérje-hálózatok intermolekuláris kölcsönhatásainak felderítése.

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

*Molekulaszerkezet kutatások.* Ráműtattak arra, hogy egyes kvantumkémiai kódok és a publikált báziskészletek automatikus alkalmazásakor a kvantumkémiai számításnak jelentős hibái lehetnek. Meghatározták az  $\text{SnI}_2$  monomer és dimer szerkezetét és termodinamikai paramétereit, mely a gőzformában történő alkalmazásaihoz fontos. A lantanida trihalogenidek és alkáli-halogenidek komplexei témában meghatározták a  $\text{NaDyBr}_4$  komplex termodinamikai jellemzőit. A termodinamikai tulajdonságok ismeretének a korszerű halogénlámpák fejlesztésében van jelentősége, mely lámpák gőzterében ezen komplexek képződnek és fontos szerepet játszanak az ott lejátszódó fiziko-kémiai folyamatokban. A 3 közleményben megjelent eredményeket 3 fő kutató és egy szaktechnikus érte el (2+1 fő TKI) kb. 6 M Ft kutatócsoporti (ebből kb. 400 E Ft pályázati) ráfordítással.

Elvégezték a 2-fluorfenol és 2,3,5,6-tetrafluoro-hidrokinon teljes rezgési spektroszkópiai jellemzését FT-IR, mátrix-izolációs FT-IR és FT-Raman spektroszkópiai mérések alapján. Kvantumkémiai számításokkal meghatározták a molekulák rezgési erőterét, normálkoordináta analízissel pedig az alaprezgések összetételét. Az eredményeket 5 fő (1 fő TKI) érte el, kb. 1,8 M Ft kutatócsoporti (ebből kb. 300 E Ft pályázati) ráfordítással.

Kvantumkémiai modellezéssel elvégezték a prion fehérje 115-122 fragmensének szerkezeti analízisét vákuumban és vizes oldatban. Kimutatták a lánc távolabbi egységei közötti N-H...O hidrogénkötéses kölcsönhatások meghatározó szerepét a különböző típusú konformerek stabilizálásában. Igazolták, hogy a 115-122 szegmens hajlamos  $\beta$ -redő típusú másodlagos szerkezet kialakítására, mely tulajdonsága feltehetően kapcsolatban van a fenti szegmensnek a prionfehérje káros szerkezeti módosulását blokkoló hatásával. Az eredményeket 3 fő (1 fő TKI) érte el, kb. 2,3 M Ft kutatócsoporti (ebből kb. 400 E Ft pályázati) ráfordítással.

*Intelligens anyagok kutatása.* Újfajta poliaminosav géleket állítottak elő, valamint továbbfejlesztették a már meglévő rendszerek előállítását. Gyógyászati célokra alkalmas hatóanyagot tartalmazó tapasz állítottak elő, melyből megvalósítható a beépített hatóanyag bőrfelületen történő kioldódása és a célterületre juttatása. Nyomótapaszok kifejlesztése során megállapították, hogy a nedvesség hatására bekövetkező gázfejlődés jelenségével fokozható a

sebfelületek kezelésére szolgáló nyomás. Az eredményeket 4 fő (1 fő TKI) érte el, kb. 2,5 M Ft kutatócsoporti (ebből kb. 1,5 M Ft pályázati) ráfordítással. A hasznosításban részt vevő ipari partnerek: Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Rt., GYSGY REHA Kft, Technoorg Linda Tudományos Műszaki Fejlesztő Kft., PEMÜ Műanyagipari Rt.

Felhasználva az anyagtudományok (nanotechnológia) fejlesztéseinek eredményeit, olyan, nem hagyományos, koncepciót vezettek be a biológiai szennyvíztisztításban, amely mikroreaktorok alkalmazásával közvetlen befolyást gyakorol a pelyhek felépítésére, textúrájára és ezeken keresztül lehetővé teszi a technológiai működés mikroszkópos dimenziókban történő közvetlen szabályozását. Az eredményeket 4 fő (1 fő TKI) érte el, kb. 2,5 M Ft kutatócsoporti (ebből kb. 1,5 M Ft pályázati) ráfordítással. A hasznosításban részt vevő ipari partner a ZENON Kft.

*Vegyipari műveletek modellezése.* Az ipari műveletek és folyamatok során keletkező melléktermékekből a hasznos ill. káros komponensek hatékony és szelektív kivonására szolgáló anyagcserélő hálózatokat modelleztek matematikai módszerekkel. Az optimalizáló algoritmus továbbfejlesztésével robosztus algoritmust dolgoztak ki, mellyel a valódi optimum nagyobb valószínűséggel megtalálható. A várható gyakorlati alkalmazás olyan elválasztási módszerek kidolgozása, melyek a korábbiaknál kisebb költséggel és kevesebb nyersanyag-felhasználással működnek. Az eredményeket 4 fő (1 fő TKI) érte el kb. 2,7 M Ft kutatócsoporti (ebből kb. 700 E Ft pályázati) ráfordítással.

*Biológiai rendszerek modellezése.* Matematikai modellt alkottak az emlős sejtciklus és a cirkadián óra (napi ritmus) kapcsoltságának vizsgálatára. A kapott eredmények szerint a cirkadián oszcillátor képes szinkronizálni egy populáció sejtjeinek ciklusát amennyiben a sejtciklus periódusideje közel 24 óra. Felfedezték, hogy erős kapcsoltság megnöveli a sejtciklus idők szórását amennyiben azok átlaga nagyban eltér 24 órától, ellenben lecsökkenti a szórását, ha a tömegduplázódási idő közel 24 óra. A modell szerint közel 24 órás emlős sejtciklus időknél az élesztőknél tapasztalt méretkontroll nem figyelhető meg, míg ettől eltérő növekedési sebességeknél a méretkontroll szerepe fontos lehet. A modell alkalmazható sejtciklusra ható rákgyógyszerek ideális napi adagolásának jóslásához. Kidolgoztak egy reakció-diffúziós modellt a hasadó élesztő növekedési mintázatára. Megmutatták, hogy az irreverzibilis sejtciklus átmenetek rendszer-szintű visszacsatolások következménye és nem fehérjék lebontásának eredménye, ahogy azt az irodalomban gondolták. Az eredményeket 5 fő (2 fő TKI) érte el kb. 3,2 M Ft kutatócsoporti (ebből kb. 2,5 M Ft pályázati) ráfordítással.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

#### Fontosabb külföldi együttműködések:

- University of Oslo (Norvégia): matrix-izolációs IR spectrozkópia
- JRC, Institute for Transuranium Elements (Németország): aktinoida kutatások
- University of Novi Sad (Szerbia): átmenetifém komplexek kutatása
- Matrix Biology Institute, Edgewater (USA): poliszacharidok szerkezeti kémiája
- Massey University, Auckland (Új-Zéland): fémhalogenid kutatások
- Univeristy of Basilicata, Potenza (Olaszország): lantanoida kutatások
- Washington State University, Pullman (USA): lantanoida kutatások
- National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Tsukuba (Japán): polimergél kutatások
- Montanuniversität Leoben, (Auszria): mágneses térre érzékeny kompozitok kutatása



- Romanian Academy of Sciences; University Politehnica Timisoara, Temesvár (Románia): strukturált mágneses nano- és mikrorészecskék kutatása. TÉT pályázatunk (RO-55/05) a kutatócsere révén jelentősen növelte a kutatás hatékonyságát.
- Russian Academy of Sciences; Moscow State University, Moszkva (Oroszország): új típusú polimer gélek kifejlesztése, molekulaszervezet kutatások

#### Fontosabb hazai együttműködések:

- Kémiai Kutatóközpont, Budapest: rezgési spektroszkópiai kutatások
- KFKI Atomenergia Intézet, Budapest: fém-halogenid kutatások
- Debreceni Egyetem, Kolloidkémiai Tanszék: biopolimerek tulajdonságainak vizsgálata
- Szegedi Egyetem, Kolloidkémiai Tanszék: intelligens iszappelyhek kutatása

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

- GVOP 3.2.2.-2004-07-0006/3.0: Intelligens polimerek és kompozitok környezetkímélő hasznosítása hálózati együttműködésben Kutatási Kooperációs Központ. A pályázat támogatásával sikerült újfajta intelligens géleket előállítani.
- NKFP-3A/081/043: Intelligens iszappelyhek nanotechnológiai konstrukciója és alkalmazása a biológiai szennyvíztisztításban.
- ERC Starting Grant: Intelligens polimerek kifejlesztése orvosbiológiai és környezetvédelmi felhasználásra. A pályázat lehetővé tette a Leobenben a magnetoreológia mérések elvégzését.
- OTKA K-68750: Multifunkcionális polimer gélek és kompozitok kifejlesztése. A pályázat lehetővé teszi a multifunkcionális polimergelek és kompozitok kifejlesztését, a pályázat keretén belül egy fiatal posztdoktor foglalkoztatását.
- OTKA K-60365: Magas hőmérsékletű szerves molekulák szerkezetvizsgálata, melyből sikeres fémhalogenid kutatásaikat valósítják meg.
- OTKA T-46183: Biológiai aktivitással rendelkező molekulák szerkezetvizsgálata, e pályázatból finanszírozzák szerves rendszerekben fellépő kölcsönhatások vizsgálatát.
- OTKA F-60414: Biológiai hálózatok reakciókinetikai vizsgálata, mely biológiai rendszerek modellezésében elért eredményeiket tette lehetővé.

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

1. Hargittai M, Varga Z: Molecular constants of aluminium monohalides: Caveats for computations of simple inorganic molecules, Journal Of Physical Chemistry A 111: 6–8 (2007)
2. Kovács A, Izvekov V, Keresztury G, Nielsen CJ, Klæboe P: Vibrational spectroscopic study of 2-fluorophenol and 2,3,5,6-tetrafluorohydroquinone, Chemical Physics 335: 205–214 (2007)
3. Záborszky J, Hong CI, Csikász-Nagy A: Computational analysis of mammalian cell division gated by a circadian clock: Quantized cell cycles and cell size control, Journal Of Biological Rhythms 22: 542–53 (2007)
4. Antal M, Filipcsei G, Zrínyi M: Rotation of disk shaped polymer composites in uniform DC electric field, Composites Science And Technology, 67: 2884–2885 (2007)
5. Emhamed AM, Lelkes Z, Rev E, Farkas T, Fonyo Z., Fraser D. M.: New hybrid method for mass exchange network optimisation, Chemical Engineering Communications 194: 1688–1701 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	7,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	5,7
PhD, kandidátus: 4	MTA doktora: 2	levelező tag: 1	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			53
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			28
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		26
nemzetközi együttműködés keretében: 14	SCI által regisztrált folyóiratban:		26
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 77,8	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		279
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:	234		
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> : 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	
<i>Idegen</i> nyelven könyv: 0	könyvfejezet: 1	jegyzet: 0	
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Értékesített szabadalmak száma:	0		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 15			posztterek száma: 6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 2	Doktori iskolát vezetőik száma:		1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> : 5	Gyakorlati kurzusok száma:		5
TDK munkát készítő hallgatók száma: 3	Diplomamunkát: 1	PhD-t: 2	
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			730
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			37 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> : 0	Teljes saját bevétel:		12,1 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			6
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			7,3 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		1,5 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> : 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		1,5 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		1,2 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## **BME FÉMTECHNOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT**

Vezető: Ginszler János, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Goldmann tér 3.  
Telefon: 463–2954, Fax: 463–3250  
e-mail: matsci@eik.bme.hu

### **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

- Az endovaszkuláris terápiában alkalmazott implantátumok anyagainak és bevonatainak kutatása.
- A növelt hőmérsékleten üzemelő szerkezeti anyagok szemcsehatárain lezajló folyamatok kutatása.
- A fémmátrixú kompozithuzalok gyártástechnológiájának fejlesztése.
- A fafeldolgozó ipar fűrészlapanyagainak gyártásában alkalmazható lézersugaras technológiák kutatása.

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

- A hazai gyártóval és más kutatási partnerekkel közösen befejezték a Sanocor sztentcsalád hazai bevezetéséhez szükséges fejlesztéseket és vizsgálatokat. Ennek eredményeképpen hamarosan megnyílik egy versenyképes, hazai gyártású koszorúér-implantátum piaci forgalmazása.  
Az eredményt 12 fős kutatócsoport érte el, akik közül 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 1,6 MFt. Együttműködő partnerek: Minvasive Kft., CVI Kht., MTA SZFKI, eucatech AG (Németország). A kifejlesztett termék – a Sanocor sztent – a CE jel megszerzése után forgalomba hozható, és ettől kezdve jelentősen hozzájárulhat a hazai szívbetegségek gyógyításához.
- A korrózióálló acélok szemcsehatár-tulajdonságainak tanulmányozásával igazolták, hogy a szemcsehatár ko incidenciája jelentős hatással van a mikroalakváltozási és a korróziós viselkedésre.  
Az eredményt 3 fős kutatócsoport érte el, akik közül 1 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 0,6 M Ft. Együttműködő partnerek: ELTE Általános Fizika Tanszék.
- Meghatározták az alumínium mátrixú kompozithuzalok nyomásos infiltrálással történő gyártásában az optimális mechanikai tulajdonságokat biztosító technológiát, és elkezdték a szintaktikus fémhabok kifejlesztését.  
Az eredményt 5 fős kutatócsoport érte el, akik közül 1 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 2,0 M Ft. Együttműködő partnerek: MTA KK.
- Ipari és kutatási partnerekkel közösen elkezdtek a növelt élettartamú, faipari szalagfűrészlapok gyártását biztosító lézertechnológiai fejlesztéseket.  
Az eredményt 12 fős kutatócsoport érte el, akik közül 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 2,4 M Ft. A fejlesztés eredményeként a versenyképesség érdemi javulása és gazdasági hasznon várható az A-LAP Kft.-nél, amely a fejlesztésre 20 M Ft-ot (Kozma László pályázati támogatást és saját forrást) fordít.
- Ipari partner (a Profilt Kft.) megbízásából közreműködtek a mikronos és szubmikronos részecskék szűrésére alkalmas folyadék- és gázsűrőrendszerek kifejlesztésében.

Az eredményt 12 fős kutatócsoport érte el, akik közül 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült ráfordítás összege 1,6 M Ft. A Profilt Kft. a kifejlesztet termék forgalmazását megkezdte, és abból üzleti haszna származik, versenyképessége egyértelműen javult.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

- A hazai kutatási partnerek körében intenzív együttműködésben álltak a következő kutatóhelyekkel: a BME számos tanszéke, MTA KK Röntgendiffrakciós Csoport, MTA SZFKI Lézeralkalmazási Osztály, Bay-ATI, Bay-LOGI.
- Szoros együttműködés alakult ki a kutatási feladatok végrehajtásában a következő ipari partnerekkel: Minvasive Kft., CVI Kht., Lasersystems Kft., Profilt Kft.
- A nemzetközi együttműködések terén új kapcsolat és együttműködés jött létre a temesvári ISIM hegesztési kutatóintézettel és a Karlsruhei Egyetem WK1 tanszékével a kompozituzalok fejlesztése terén.
- A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet vállaltak a BME ATT oktatási tevékenységében: ennek keretei között több tantárgy előadásait gondozták a nappali és a doktori képzésben, valamint a hegesztőszakmérnök-képzésben.

### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

2007-ben a következő pályázatot nyerte el a kutatócsoport egyik kutatója: K69122 (NKTH-OTKA), a kutatási téma címe: Fázishatárok kialakulása és stabilitása fémmátrixú kompozitokban és többfázisú ötvözetekben (kutatóhely: BME), 3 év, támogatás: 14,7 M Ft.

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

1. Ginsztler J, Major L, Puskás Zs, Koós M, Dobránszky J, Giese M, Szabó B, Albrecht K: Development and Manufacturing of Coronary Stents in Hungary, Materials Science Forum 537–538: 631–638 (2007)
2. Mészáros I, Ginsztler J: Material deterioration induced magnetic anisotropy, Materials Science Forum 537–538: 419–419 (2007)
3. Mészáros I, Ginsztler J: Magnetic investigation of thermal shock fatigue process, Key Engineering Materials 345–346: 1283–1286 (2007)
4. Devenyi L, Rusinko AK, Ginsztler J: Analitic Description of the Formation of Pores under Conditions of Steady-State Creep of Materials, Strength of Materials 39(1): 74–79 (2007)
5. Gaál Z, Szabó PJ: Evolution of Grain Boundaries in Austenitic Stainless Steels., Materials Science Forum 537–538: 355–361 (2007)
6. Dobránszky J, Ginsztler J: Microstructural Stability of Duplex Stainless Steel Weldments, Materias Science Forum 561–565: 2119–2122 (2007)
7. Bognár E, Ring Gy, Marton HZs, Dobránszky J, Ginsztler J: Polyurethane coating on coronary stents, Key Engineering Materials 345–346: 1269–1272 (2007)

8. Ring Gy, Bognár E, Dobránszky J: Coronary Stents' Materials and Examinations of Surface and Expansion Features, *Materials Science Forum* 537–538: 449–455 (2007)
9. Bognár E, Ring Gy, Dobránszky J: Investigation of coated coronary stents, *Materials Science Forum* 537–538: 307–314 (2007)
10. Veres M, Tóth S, Füle M, Dobránszky J, Major L, Koós M: Raman analysis of diamond-like carbon films deposited onto corrosion resistant alloys used for coronary stent fabrication, *Materials Science Forum* 537–538: 277–283 (2007)
11. Sándor T, Dobránszky J: The experiences of activated tungsten inert gas (ATIG) welding allied on 1.4301 type stainless steel plates, *Materials Science Forum* 537–538: 63–70 (2007)
12. Orosz Cs, Palotás B, Dobránszky J: Welding Investigations of Modern High Strength Dual Phase and TRIP-steel for Automotive Industry application, *Materials Science Forum* 537–538: 431–438 (2007)
13. Bella Sz, Bernáth A, Dobránszky J: Microsudare WIG, cu fascicul laser și electrică prin presiune în relief – TIG, Laser Beam and Resistance Projection Microwelding, *Bid-ISIM Welding and Material Testing* 16(1): 25–34 (2007)
14. Kientzl I, Dobránszky J: Production and Examination of Double Composites, *Materials Science Forum* 537–538: 191–197 (2007)
15. Magasdi A, Dobránszky J, Tusz F, Ginsztler J: Fatigue Properties of Welded Joints of High-Carbon Steels, *Materials Science Forum* 537–538: 47–53 (2007)
16. Kientzl I, Dobranszky J, Ginsztler J: Heat treatment and impact testing of composite wires. *Key Engineering Materials*, 345–346, pp. 1273–1276 (2007)
17. Gaál Z, Szabó PJ, Ginsztler J: A termomechanikus kezelés hatása a szemcsehatárokra. 15th International Conference in Mechanical Engineering, XV. OGÉT 2007, Kolozsvár, 118–122.

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Fémtechnológiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3,5
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			27
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			27
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	6	SCI által regisztrált folyóiratban:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	0	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	18
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			18
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	3
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	16	posztterek száma:	6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	2	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	6	Gyakorlati kurzusok száma:	4
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	9
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	8
			840
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			24 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	1,8 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,9 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,8 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## BME FIZIKAI GEODÉZIA ÉS GEODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Ádám József, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.  
Telefon: 463-3222, Fax: 463-3192  
e-mail: jadam@sci.fgt.bme.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

*Regionális földi nehézségi erőter modellezés* témájában tovább folytak a kutatások. Jelentős eredmény az Eötvös-inga adatok legkisebb négyzetes kollokáció keretében történő felhasználása regionális erőter modellezés céljára. Sikeresen kombinálták a felszíni gravitációs gradienseket gravimetriai, asztrogeodéziai és GPS-szintezési adatokkal és így előállítottak Magyarország területére egy új, kombinált geoidmegoldást. További fontos eredményeik a gravimetriai geoidkép GPS/szintezési adatokkal történő korrekciója kapcsán adódtak. Harmadfokú spline interpoláció felhasználásával a felületillesztés 1-2 centiméteres pontossággal megoldhatóan bizonyult.

A *gravimetriai alaphálózatok* újramérése esetén célszerű a korábbi és az új hálózat adatai között *transzformációs függvényt* meghatározni. Az MGH-50 és az MGH-2000 magyarországi, továbbá az MGH-2000 magyar és az UEGN-2000 európai gravimetriai alaphálózatok közötti transzformációs függvény meghatározására végeztek vizsgálatokat.

Kutatásaik során a felszín közeli vizek mozgásának gravitációs hatását és a *nehézségi erőter időbeli változásának* kapcsolatát is vizsgálták. Meghatározták a nehézségi erőternek az Alföld teljes területére a talajvízszint ingadozása következtében várható változását, amely alapján elmondható, hogy a graviméteres mérések pontosságának már nem műszertechnikai korlátai vannak, hanem ezt elsősorban külső körülmények, mint a talajvízszint ingadozása vagy a talajnedvesség változása szabják meg.

A *műholdas gravimetria* területén nemzetközi értelemben hiánypótló részmunkálatokat végeztek. A műholdak pályameghatározásával kapcsolatban numerikus differenciálási technikákkal végzett sebességhatározással foglalkoztak. A különféle vizsgált interpolációs technikák közül mind valódi adatokon (CHAMP), mind szimulált adatokon (GOCE) az ún. Newton-Gregory interpoláció bizonyult a legmegfelelőbbnek. A műhold fedélzetén elhelyezett gyorsulásmérő adatainak feldolgozásával (ún. *accelerometria*) kapcsolatban az ismeretlen eredetű szabályos hibajelenségek (ún. „twang” és „peak”) kezelésére, valamint a zajszűrésre módszereket kidolgoztak ki, amelyek a fejlesztő cég feldolgozási eljárásánál hatékonyabban végzik feladatukat.

A kutatócsoport részt vett a Galileo rendszer helymeghatározási pontosságának, illetve integritásának növelését célul kitűző GALILEA projektben. A nemzetközi konzorcium tagjaként egy kiegészítő rendszer megvalósíthatóságát vizsgálták meg, amely segítségével a műholdrendszer működése valós időben nyomon követhető, és a működési zavarok gyorsan észlelhetőek.

A csoport a *műholdradar interferometria* és a *GPS geodinamika* terén kialakított egy információs rendszert a műholdradar interferometriáról. A webes felület a műholdak, adatok, elméletek, programcsomagok és egyéb, a technikát érintő kérdésben ad választ és tájékoztatást az érdeklődőknek.

A *nagyon hosszú bázisvonalú interferometria (VLBI) technika* számára új célterületet jelentenek a halvány extragalaktikus rádióforrások. A csoport folytatta a halvány extragalaktikus rádióforrások szisztematikus felmérését célzó DEVOS (Deep Extragalactic VLBI-Optical Survey) programot, az Európai VLBI Hálózat használatával. Egy újszerű megfigyelési eljárással nagy számban térképezhetők fel a jelenleg jól ismerteknél egy-két nagyságrenddel halványabb rádiósugárzó kompakt aktív galaxismagok. Ezekkel azután mód

nyílik a teljes mezők halvány csillagainak elhelyezésére a rádiótartományban definiált legpontosabb égi vonatkoztatási rendszerben (ICRF). A közelmúltban felfedezett, napi időskálán belüli jelentős fényességváltozásokat mutató J1128+592 jelű kvazárral kapcsolatban VLBI megfigyeléssorozat folyik az amerikai VLBA rádióteleszkóp-hálózattal. A csoport munkatársai vizsgálták egyedi kompakt kvazárok nagyfelbontású szerkezetét űr-VLBI technikával.

Az űr-VLBI mérésekhez használt mesterséges holdak pályájának vizsgálata számára fontos az Interball-1 mozgásával kapcsolatos eredményeik. A vizsgálathoz használt módszer nagyon hatékonyan bizonyult, a kezdeti pályaadatokból kiindulva öt évre előre, az űreszköz életének a végéig nagy pontossággal meg tudták jósolni a mesterséges hold pályáját. Az Interball-1 mozgását a Hold erősen perturbálta, ennek kapcsán megvizsgálták a Naprendszerben található további kettősrendszerek körüli pályák stabilitását. A negyedik és ötödik sorszámú Lagrange-pontjainak megvizsgálták a stabilitását az egymáskörül keringő égitestek tömegarányának függvényeként.

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

A kutatócsoport feladatainak jelentős részét alapkutatási témák adják, amelyektől közvetlen, gyors gazdasági megtérülés nem várható. Ennek ellenére a kutatócsoport tevékenysége számos ponton kapcsolódik fontos alkalmazási területekhez is, így az alap- és alkalmazott kutatások együtt vannak jelen tevékenységünkben, amely nagyobb nyitottságot, alkalomadtán a kutatási módszerek többcélú alkalmazását, kölcsönös adaptálását teszi lehetővé.

A GRACE-mérésekből előállítható geopotenciális modellek által jobban megismerhetők a földi hidrológiai és oceanográfiai jelenségek, amelyek a globális éghajlatváltozás első számú megnyilvánulásai. Ennek társadalmi haszna egyre nyilvánvalóbb napjainkban. A GRACE-mérések feldolgozása során azonban egyelőre nem érték el a kutatók az elvárt pontosságot, ezért is alapvető fontosságúak az accelerometriában elért eredményeik, amelyeket a fejlesztő intézet csak zárt körben kiadott adatok rendelkezésünkre bocsátásával ismert el (Kutatói team: 2 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 2 fő).

A gravitációs gradienseken, gravimetriai, asztrogeodéziai és GPS-szintezési adatokon alapuló kombinált regionális (Magyarország területén optimális) geoidmegoldásnak a GPS-technika alkalmazhatósága tekintetében van óriási gazdasági haszna, hiszen a GPS-technikát így olyan pontossággal tudják a gyakorlati életben magasságmeghatározásra használni, mellyel a költséges, hagyományos szintezés kiváltható. (Kutató team: 5 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 2 fő).

A GALILEA projektben a Galileo műholdrendszert valós időben nyomon követő segédrendszer kialakításán dolgoztak. A javasolt rendszer lehetőséget biztosíthat az életbiztonságot befolyásoló területeken (pl. vasút, hajózás, légi közlekedés) a műholdrendszer alkalmazhatóságának. (Kutatói team: 4 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 2 fő).

A műholdradar interferometria (PSInSAR) alkalmas az emberi tevékenység okozta felszínmozgás detektálására a sűrűn lakott területeken is, eredményeiket a gazdaság és a társadalom számos területen hasznosíthatja. Így például a mérési adatok alapján nagyobb építési beruházások megkezdése előtt megismerhető a terület mozgástörténete, komoly alkalmazási terület lehet az árvíz- és katasztrófavédelem, vagy az ipari tevékenység következtében kialakult hatások vizsgálata, mint pl. bányászat következtében kialakult felszínmozgások. (Kutatói team: 2 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 2 fő).

A legpontosabb kvázi-inerciális vonatkoztatási rendszert (ICRF) a távoli rádiósugárzó kvazárok VLBI megfigyelései alapján definiálták és tartják fenn. A VLBI technika geodéziai alkalmazásával azután a Föld forgási sebességének változásai, a forgástengely irányának



változása, az antennák földfelszíni helyzetének változása, a tektonikus lemezmozgások nagy pontossággal nyomon követhetők. Mindennek az időméréstől kezdve a navigációs műholdrendszerek fenntartásán keresztül a globális klíma folyamatainak figyeléséig számos közvetett alkalmazási területe említhető. (Kutatói team: 2 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 2 fő).

A Napon lejátszódó jelenségek hatására a Föld magnetoszférájában bekövetkező heves változások hatalmas károkat okozhatnak (GPS, távközlési és meteorológiai műholdakat tehet tönkre, de akár a földi elektromos hálózatot is). Kutatásuk úridőjárást vizsgáló Interball-1 mesterséges holddal foglalkozott, illetve ennek kapcsán a Lagrange-pontok dinamikai vizsgálatát végezték. Eredményeik figyelembevételével hosszabb távon előrejelezhetővé válhatnak a napkitörések. (Kutatói team: 5 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 2 fő).

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

International Association of Geodesy (IAG), Communication and Outreach Branch (COB) működtetése 2003-tól. BME Általános- és Felsőgeodézia Tanszékének oktatói munkáiban jelentős részt vállalnak. Eötvös Loránd Tudományegyetem, Csillagászati Tanszék és Fizika Doktori Iskola: óraadás („Radio Astronomy I-II.” speciális előadás), diplomamunka témavezetés, szigorlati bizottsági és bírálóbizottsági tagság, Joint Institute for VLBI in Europe (JIVE), Dwingeloo, Hollandia, VLBI Space Observatory Programme-2 (VSOP-2) Európai Munkacsoport tagság. Japan Aerospace Exploration Agency (JAXA), Institute of Space and Astronautical Science (ISAS), Sagami-hara, Japán, Japan Society for Promotion of Science (JSPS) ösztöndíjt nyert el egy kutatójuk az MTA-JSPS pályázat keretében. Egy kutatójuk CEGRN Consortium titkár, GMES TerraFirma Magyarország képviselő. Továbbá nem hivatalos keretek között érdemi munkakapcsolatban vannak a Münchener Műszaki Egyetem Csillagászati és Fizikai Geodéziai Intézetével (IAPG, TUM), a Kyotói Egyetem Felsőgeodéziai Laborjával (KUGI) és Katasztrófa Megelőzési Kutatóintézetével (DPRI).

### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

Nemzetközi: ESRIN/Contract no. 19366/05/I-EC, EU-ESA GMES TerraFirma H2 fázis 2007-ben kezdődött, áthúzódik 2008-ra, összeg: 7543 EUR.

Hazai: KvVM-MŰI TP-314 2007-ben kezdődött, áthúzódik 2008-ra, szerződésállomány: 2 M Ft; KvVM-MŰI, K-36-07-00023K 2007-ben kezdődött, áthúzódik 2008-ra, szerződésállomány: 2,2 M Ft.

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

1. Gabányi KÉ, Marchili N, Krichbaum TP, Britzen S, Fuhrman L, Witzel A, et al. (12 szerző): The IDV source J1128+5925, a new candidate for annual modulation? *Astronomy and Astrophysics*, Vol. 470, Issue 1, pp.83–95 (2007)
2. Gabányi KÉ, Marchili N, Krichbaum TP, Britzen S, Fuhrman L, Witzel A, et al. (12 szerző): J1128+592: a highly variable IDV source. *Astronomische Nachrichten*, Vol. 328, Issue 8, pp.863–866 (2007)
3. Érdi B, Nagy I, Sándor Zs, Süli Á, Fröhlich G: Secondary resonances of co-orbital motions, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 381, 33 (2007)
4. Nagy I, Süli Á, Érdi B: Numerical investigation of the orbit of Interball-1, *Astronomische Nachrichten*, Vol. 328, Issue 8, pp.793-796 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	12	Ebből kutató <sup>2</sup> :	12
PhD, kandidátus:	7	MTA doktora:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
			4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			27
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			25
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	5
nemzetközi együttműködés keretében:	5	SCI által regisztrált folyóiratban:	5
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	13,225	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	10
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	12	posztterek száma:	6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	6	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	10	Gyakorlati kurzusok száma:	25
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	1
		PhD-t:	0
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			2200
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			23 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	14 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	6,2 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,1 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7,7 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## BME GÉPEK ÉS JÁRMŰVEK DINAMIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Vezető: Stépán Gábor, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 5.  
Telefon: 463–1369, Fax: 463–3471  
e-mail: stepan@mm.bme.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

*Járművek stabilitási- és rezgésvizsgálata* kapcsán klasszikus sajátfrekvencia számítási algoritmusok továbbfejlesztése, illetve a műanyag alkatrészek viselkedésének leírásához új anyagmodell kidolgozása történt meg. A rezgések kialakulásában kulcsszerepet játszik a kerék-talaj kapcsolat. Ennek vizsgálata ígéretes eredményekhez vezetett, melyek az elektronikus menetstabilizáló rendszerek (ABS, ESP) továbbfejlesztése során hasznosulhatnak.

Az elektronikus menetstabilizáló rendszerek és a modern fékberendezések *számítógépes szabályozással* működnek. A digitális hatásokhoz köthető nemlinearitások és az azok következményeképpen kialakuló kaotikus rezgések vizsgálata folytatódott a beszámolási évben. Digitális erőszabályozású robotok viselkedésének kísérleti és elméleti vizsgálatával kapcsolatban újabb eredmények születtek, melyek az ún. szervíz robotok (emberekkel együttműködő robotok) kifejlesztésében lesznek használhatók. A nemlineárisan viselkedő rendszerek kapcsán összegyűlt tapasztalatok alapján lehetőség nyílt a forgácsolás során bekövetkező kaotikus viselkedés tanulmányozására.

Folytatódott a *járműalkatrészek tönkremenetelének* vizsgálata is. Elméleti síkon az ún. Portevin-Le Chatelier hatás és az anyagi instabilitás elméletének a tanulmányozása történt meg, a gyakorlatorientált kutatások pedig a csavar- és szegecskigombolódás kísérleti vizsgálatára koncentráltak.

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

A közúti balesetek nagy része visszavezethető a járművek stabilitási problémáira, ezért a korszerű gépkocsikban biztonsági elektronikai rendszereket (ABS, ESP) használnak. Az ilyen rendszerek hatékony működése nagyban függ az alkalmazott kerékmodellről. A kutatócsoportban kifejlesztett új gumikerék modell az eddig ismert modelleknél pontosabban írja le a gördülés során fellépő stabilitási problémákat. Az új kerékmodell fejlesztése egy ismert járműdinamikai probléma, a kerékszitalás (simmi) alapján történik. Ezt a rezgő mozgást hétköznapi rendszerességgel bevásárlókocsik kerekeinél figyelhetjük meg, de ugyanez a mozgás jelentkezik motorkerékpároknál és repülőgép orrfutóknál is. 2007-ben egy korábban készült kísérleti berendezés átépítése fontos és értékes mérési eredményeket eredményezett. Ezek alapján sikerült a kerékmodell úgy továbbfejleszteni, hogy az elméleti és a gyakorlatban megfigyelt stabilitási határ minimális eltérést mutat. Az új kerékmodell jelentősége abban áll, hogy segítségével az ABS és ESP rendszerek új generációja jöhet létre.

Jármű alkatrészek – melyek egyre nagyobb számban készülnek műanyagból – rezgéseinek pontos leírásához megfelelő anyagmodellekre van szükség. Az év első felében a lineáris viszkoelasztikus modell egyik végeeselemes számítási módszerének vizsgálata történt meg, mely annak igazolását és finomítását eredményezte. A csillapítás pontosabb

meghatározásához törtrendű deriváltakat tartalmazó anyagmodellek alkalmazása kezdődött meg. Az első eredmények szerint a végeselemes feladatok megoldásához általában használt eljárások elég hatékonyak, az irodalomban talált más lehetőségek csak egyes részfeladatok megoldásában gyorsabbak.

A 2007-től induló kutatási terv célul tűzte ki rúdszerkezetként modellezhető, végtelen szabadságfokú feladatok vizsgálatát. A kidolgozásra kerülő eljárás – mely sajátfrekvenciák közelítő számítására szolgál – alkalmazása két szempontból is nehézségekbe ütközik. Egyik a bonyolult matematikai modell kezelése, a másik az alsó és felső korlátok közötti egyre nagyobb távolság magasabb frekvenciák behatárolása esetén. A kutatások eredményeképpen valamelyest csökkent a probléma kezelésének időigényessége, és a frekvenciák behatárolásával kapcsolatos probléma vizsgálata is megkezdődött.

*A járművek stabilitási- és rezgésvizsgálatával* kapcsolatos eredményeket négy fős csoport érte el, mindannyian a kutatócsoport tagjai. A ráfordítás becsült összege: 11,6 M Ft.

A mikro-káosz leképezés digitálisan szabályozott rendszerek egyszerű modelljének tekinthető. A leképezésnek tranzienst kaotikus megoldásai is lehetnek, ami jelentősen növelheti a szabályozási időt. 2007-ben sikerült tisztázni a tranzienst időtartamát becsülő módszerek kiterjesztésének lehetőségeit. Folytatódtak a többdimenziós leképezések kaotikusságának bizonyítását célzó vizsgálatok is: egy PD és egy differenciális (D) szabályozás esetében a digitális hatásokat figyelembe véve kétdimenziós, szakaszosan lineáris leképezések adódnak. Mindkét esetben sikerült kimutatni kaotikus megoldások létezését, a differenciális szabályozás esetére a bizonyítás is elkészült. Ezek a vizsgálatok elméleti alapot szolgáltatnak a korszerű szabályozási rendszerek továbbfejlesztéséhez.

2007-ben a robotok digitális erőszabályozásának stabilitásával kapcsolatos korábbi elméleti eredmények kísérleti igazolása történt meg. A környezetét megérintő robot merevségének és a digitális mintavételezésnek a stabilitásra gyakorolt hatását modellezve, PD szabályozó alkalmazásával sikerült kimérni a rendszer stabilitási térképét a paraméterek függvényében. A kísérletek kapcsolódnak a 2007-ben indult ACROBOTER projekt munkájához. A kutatás célja egy új típusú szervizrobot kifejlesztése, mely hatékony akadálykerülő képességgel rendelkezik és a hétköznapi élet széles területén használható.

A beszámolási évben megtörtént a forgácsolási folyamat korábban felállított kontinuummechanikai modelljének kísérleti eredményekkel való összevetése. A kísérletek során folyóforgács, periodikus és aperiodikus forgács keletkezett. A modell – ezzel összhangban – fixpont jellegű, periodikus, illetve kaotikus megoldásokat szolgáltatott. A felállított modell lehetővé teszi a technológiai folyamat lehetséges variációinak gyors áttekintését.

*A számítógépes szabályozással* kapcsolatos eredményeket öt fő érte el, ebből három tagja a kutatócsoportnak. A ráfordítás kb. 9,6 M Ft, pályázatból 1 M Ft.

A Portevin-Le Chatelier hatást a szakirodalom két eltérő módon tárgyalja. A makroszkopikus tárgyalásmód nagyon hasonlít a kutatócsoportban alkalmazott, a dinamikai rendszerek elméletére alapozott vizsgálathoz. Emellett ismert egy diszlokációk mozgására épített magyarázat is. A 2007 évi kutatómunka a két elmélet egyesítésére irányult. Az anyagi instabilitás vizsgálata során elkezdődött a dinamikai rendszerek stabilitási kritériumainak a variációs elvekhez kapcsolható alkalmazási lehetőségeinek keresése. Az új megközelítés alapján a szilárd kontinuumok feltételes variációs elv felhasználásával történő modellezése vált lehetővé az anyag stabilitásának feltételezése mellett.

A csavarkihúzódasos kísérletek során a jellemző törésképeket sikerült meghatározni a különböző csavar elrendezések esetén és a kapcsolódó anyagvizsgálatok is rendelkezésre állnak. Jelenleg a numerikus számítás kidolgozása van folyamatban. A legfőbb probléma a nem szokványos anyagmodell felállítása. Az eddigi modellel a szakadási kép megjósolható, de a kiszakadó erő kisebb mint a kísérleti eredmények. A kutatás végső célja a csavar kiszakadás mint jelenség jobb megértése és ennek következtében egy pontosabb modell kidolgozása az ellenőrző számításokra. Az eddig szerzett tapasztalatok segítettek más tönkremeneteli problémák megoldásában is.

A *járműalkatrészek tönkremenetelével* kapcsolatos eredményeket két fő érte el, mindketten a kutatócsoport tagjai. A ráfordítás kb. 6,6 M Ft, ebből pályázati forrás 800 E Ft.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

*Felsőoktatási kapcsolatok:* BME, Pécsi Tudományegyetem; Arisztotelész Egyetem, Thessaloniki; McGill University, Canada; University of Bristol, UK; Michigan State University, USA

*Folyóirat szerkesztőbizottsági tagságok:* Periodica Polytechnica, Meccanica, J. Vibration and Control, J. of Nonlinear Science, J. of Computational and Applied Mechanics, Transactions of the Royal Society, Computers and Structures, Int. J. of Aerospace Engineering, Physica D, Mechanism and Machine Theory

*Konferencia bizottsági tagságok:* CASYS07, CPEA 2007, MaMeK 2007

*Tisztségek nemzetközi szervezetekben:* Secretary, IFToMM Technical Comm. of Nonlinear Oscillations; CISM Scientific Council; European Solid Mechanics Conference Committee

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Három folyamatban lévő OTKA pályázat mellett elkezdődött az EU FP6-os program keretében az ACROBOTER projekt. A nemzetközi részvétellel folytatott kutatás célja egy új típusú szervizrobot kifejlesztése. A projekttel kapcsolatos munka a tervezett ütemben halad.

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

1. Béda PB: On dynamical systems at the Portevin-Le Chatelier effect, Key Engineering Materials, 340–341, pp. 301–306, 2007
2. Csernák G, Stépán G, Shaw SW: Sub-harmonic Resonant Solutions of a Harmonically Excited Dry-friction Oscillator, Nonlin. Dynamics, 50, pp. 93–109, 2007 (IF=0.902)
3. Topping BHV, Iványi P: Computer Aided Design of Cable-Membrane Structures, Saxe-Coburg Publications, Stirling, (2007)
4. Kovacs J, Kovacs LL, Stépan G: Dynamics modeling and stability of robotic systems with discrete-time force control, Archive of Applied Mechanics, 77, pp. 293–299, (2007)
5. Takács D, Stépán G, Hogan SJ: Isolated large amplitude periodic motions of towed rigid wheels, Nonlinear Dynamics, appeared online, DOI: 10.1007/s11071-007-9253-y, (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	4,8	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,8
PhD, kandidátus: 4	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			11
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			11
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		4
nemzetközi együttműködés keretében: 3	SCI által regisztrált folyóiratban:		4
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 2,618	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		17
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			17
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> : 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	
<i>Idegen</i> nyelven könyv: 1	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 1
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 13	posztterek száma:		1
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		10
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 1	Doktori iskolát vezetőik száma:		0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> : 14	Gyakorlati kurzusok száma:		34
TDK munkát készítő hallgatók száma: 0	Diplomamunkát: 0	PhD-t: 0	
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			1288
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			26 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> : 1	Teljes saját bevétel:		3,1 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			3,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		30 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## BME IRÁNYÍTÁSTECHNOLÓGIAI KUTATÓINTÉZET

Vezető: Keviczky László, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Goldmann György tér 3.  
Telefon: (1) 463–2870, Fax: (1) 463–2871  
e-mail: keviczky@sztaki.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Holtidős folyamatok optimális szabályozása. Az állapotvisszacsatolás és polinomiális módszerek kutatása labilis folyamatok stabilizálására. Határ-optimális szabályozók kutatása. Robusztus rendszeridentifikációs kutatások, alter alapú módszerek kidolgozása. Predikciós irányítási algoritmusok hatékonyságának növelése. Intelligens alakfelismerő rendszer fejlesztése. A nemlineáris hatások vizsgálata a bifunkciós folyamatokra az állapotváltozóktól függő módon felépítésüket változtató rendszerekben.

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

Társadalmi hasznúnak és kiemelkedőnek tartják a szabályozástechnika színvonalának emelését a BME Villamosmérnöki és Informatika Karának Informatikai szakán. A tárgyat a 3. évfolyamon több mint 300 hallgató veszi fel. A tárgyhoz új elméleti és gyakorlati jegyzet készült. Az oktatók száma 6 (ebből a kutatócsoport tagjainak száma 4). Ugyanezen anyagok alapján történik a szabályozástechnika oktatása a SZE Műszaki Tudományi Karán. A tárgyat mintegy 100 hallgató veszi fel. [26]

Megadták a csak a nominális és az előző módszerrel kapott optimális referencia modellektől függő optimális szabályozók algoritmusait, amelyek a realizálhatósági veszteséget minimalizálják. Az optimális szabályozókat stabilis folyamatok *Youla-parametrizált* szabályozási köreire határozták meg. Az optimalitás kritériumaként a  $H_2$ ,  $H_{\infty}$  és  $L_2$ ,  $L_{\infty}$  normákat alkalmazták. Optimális integráló szabályozóhoz az eredeti normákat speciális „energia”, illetve „supremum” normákká kellett kiegészíteni az  $L_2$ ,  $L_{\infty}$  normák egyidejű alkalmazásával és nem DIRAC-delta alakú gerjesztés feltételezésével [5], [7], [8], [10].

Megmutatták, hogy a klasszikus SMITH szabályozó a *Youla-parametrizált* szabályozók speciális esete. Ugyanakkor az általános tervezési módszer sokkal jobb perspektívát és lehetőségeket nyújt, mint a klasszikus módszer [4], [6], [11].

Az állapotvisszacsatoláson alapuló póluselhelyezési módszerek igénylik a folyamat paraméter mátrixainak pontos ismeretét. Ennek ellenére a megfigyelővel kiegészített állapotvisszacsatolás elég jó eredményeket nyújt viszonylag nagy modell bizonytalanságok esetén is. A hiba-terjedés analizálásával megmutatták, hogy a modell bizonytalanság hogyan befolyásolja a kombinált módszer tulajdonságait [1]

Megvizsgálták az ún. ancilla (azaz segéd) kvantum-rendszert felhasználó mérési stratégiát abból a szempontból, hogy a nyert mérési információ és a mérés által a rendszerre gyakorolt hatás aránya milyen paraméterek mellett lesz optimális [29]

A komplex, nagyméretű folyamatrendszerek dinamikus modellezésére használatos többléptékű (multi-scale) modellezési módszerre alapozva került kidolgozásra egy olyan diagnosztikai módszer, amely a rendszerről rendelkezésre álló meghibásodás hatáselemzés

(FMEA), valamint veszély és működőképesség analízis (HAZOP) információk felhasználásával prediktív diagnosztikára és veszteség-megelőzésre is képes. [30]

Módszert dolgoztak ki járművek irányítási tervezésében a csúszás megelőzésére. Az aktuális kerék-sín surlódási együttható becslésére szolgáló módszer az adaptív megfigyelő tervezési módszeren alapul. Egy olyan logikai sémát javasoltak melynek alapján megbecsülhető az a munkapont, melyben nincs kerékcsúszás. Ezt a becslést felhasználó olyan hagyományos irányítási algoritmust alkalmaznak, ami a rendszert az előírt munkapontban tartja. A javasolt irányítási eljárás nem a mért csúszási arány értékén alapul. [27]

Nemlineáris rendszerek egy osztályára alkalmazható a kvázilineáris változó paraméterű struktúra (qLPV), amelynek segítségével újszerűen közelíthető meg adaptív rendszerek robusztussága. A javasolt módszer segítségével hatékony módszerek dolgozhatók ki, ha a paraméterfüggés a folyamatban és a szabályozóban is lineáris törtfüggvény alakú. [28]

Új eljárást dolgoztak ki a nemlineáris tapadó-csúszó surlódási jelenségek modellezésére és paraméter identifikációjára. A modellre alapozva robusztus adaptív szabályozási algoritmust fejlesztettek ki, és Ljapunov-technikával igazolták a követési hiba korlátosságát zavarás és modellezési hibák esetén. Az elmélet helyességét kísérleti rendszeren is demonstrálták. [31]

Gépjárművek hullámhajtóművet alkalmazó elektronikus kormányzási rendszeréhez nemlineáris prediktív irányításon alapuló algoritmust dolgoztak ki, amely jó kormányzási érzetet biztosít a vezető számára, ugyanakkor garantált stabilitást és megfelelő kompromisszumot a nyomaték és pozíció követés között. Az elmélet helyességét kísérleti rendszeren is demonstrálták. [32]

Kiemelkedő kutatási eredményt egy kombinált fotóvillamos-termikus energia rendszer fejlesztésében és vizsgálatában értek el. [39]

Kísérletekkel is igazolt új laboratóriumi módszert dolgoztak ki az inherensen nemlineáris villamos rész statikus és dinamikus, több paraméteres karakterisztika seregének kísérleti felvételére, továbbá új eljárást vezettek be a fotocellák állandóan változó maximális teljesítményű pontját folyamatosan és automatikusan kikereső szabályozására. Ez a kutatás nemzetközi kooperációban, spanyol közreműködéssel folyt, magyar részről két fő részvétellel. [42]

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

Részt vesznek az IFAC Nemzetközi Automatizálási Szövetség CC2 Control Design Methods Koordináló Bizottságának munkájában. A 2007. évben sok feladatot jelentett a 2008 júliusában Seoulban tartandó világkongresszus előkészületeiben való részvétel.

A kutató csoport aktívan vesz részt a MATE – Automatizálási, Méréstechnikai és Informatikai Egyesület munkájában.

A Kölni Műszaki Főiskola Folyamatszabályozási Tanszéke és a kutatócsoport együttműködésében (amit a két egyetem közötti Socrates-Erasmus együttműködés is támogat) PhD kutatást irányítanak.

Az Oului Egyetem (Finnország) Systems Engineering Laboratory és a BME Automatizálási és Alkalmazott Informatika Tanszéke együttműködését Socrates-Erasmus együttműködés támogatja. Ennek keretében Ouluban 2 BME villamoskari hallgató irányítástechnikai témájú diplomatervét konzultálják.



Jó kapcsolat alakult ki a Technion Israel Institute of Technology Aeronautical Engineering Tanszékével, az általuk tartott szimpóziumon (Int. Symposium on Guidance and Differential Games) előadás hangzott el a kutatócsoport részéről.

2009-ben az ECC (European Control Conference) Budapesten kerül megrendezésre. Ez a kutatócsoport által is képviselt tudományos iskola egyik legnagyobb nemzetközi elismerése, hiszen a rendezvény általános elnöke és a Nemzetközi Program Bizottság elnöke is tagja a kutatócsoportnak. A csoportból többen részt vesznek az előkészítési munkákban.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

OTKA K-71762 Autonóm földi, légi és vízi robotok irányításmélete és mesterséges intelligencia eszközei 2008-10. A kutatócsoportból 1 fő vesz részt.

OTKA T46220 Az elméletileg elérhető legjobb irányítás algoritmusainak kutatása 2004-07. A kutatócsoportból 3 fő vesz részt.

OTKA T46240 Változó struktúrájú visszacsatolt szabályozott rendszerek elmélete 2004-07. A kutatócsoportból 2 fő vesz részt.

OTKA T68370 A kutatócsoportból 3 fő vesz részt.

NKTH 04/2004 RET Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont. 2004-07.

A kutatócsoportból 5 fő vesz részt.

NKFP 3A/086/2004 Környezetbarát villamosenergia termelés megújuló hulladék energiából 2004-07. A kutatócsoportból 1 fő vesz részt.

MOBEDU ERASMUS pályázat, Mobil készülékek szoftvere témakörben, 2005–2007, magyar, cseh, finn, dán, litván részvétellel. A kutatócsoportból 1 fő vett részt.

EU Leonardo Projekt CZ/6/B/PP 2006-09. E-learning distance interactive Practical Education. 2006-09. A kutatócsoportból 1 fő vesz részt.

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

1. Vajk I: Identifikáció zajos mérésekből EVD-SVD alapú algoritmusokkal, Doktori értekezés, MTA. (2007)
2. Hamar, J, Buti, B, Nagy, I.: Dual Channel Resonant DC-DC Converter Family, EPE Journal, Vol. 17, No. 3, October 2007, pp. 5–15.
3. Keviczky L, Bányász Cs: On the H<sub>2</sub> and H-infinity optimality of some two-degree of freedom control systems In: 16. Int Conf. Systems Science , Wroclaw, PL, (2007)
4. Bokor J: Robust adaptive control: the qLPV paradigm In: European Control Conference, Kos, GR, pp CD (2007)
5. Márton L, Lantos B: Modeling, identification and compensation of stick-slip friction, IEEE Tr. Industrial Electronics 54(1): 511–521 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Irányítástechnikai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	1,1	Ebből kutató <sup>2</sup> :	0,6
PhD, kandidátus: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			51
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			51
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		12
nemzetközi együttműködés keretében: 5	SCI által regisztrált folyóiratban:		12
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 0,86	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		73
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			73
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> : 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 1	
<i>Idegen</i> nyelven könyv: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 37			posztterek száma: 0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 13	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		4
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			9
Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 4	Doktori iskolát vezetőik száma:		1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> : 9	Gyakorlati kurzusok száma:		0
TDK munkát készítő hallgatók száma: 11	Diplomamunkát: 7	PhD-t:	8
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			37
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			15 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> : 0	Teljes saját bevétel:		0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			2
NKFP: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## BME KONDENZÁLT ANYAGOK FIZIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Vezető: Jánossy Andárs, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest Budafoki út 8. l. lh. 1. em.  
Telefon: 463–1391, Fax: 463–3819  
e-mail: atj@szfki.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A munka elsősorban alapkutatás jellegű, a kölcsönható kondenzált anyagok kísérleti, elméleti és számítógépes vizsgálatára irányul. A fő területek

- I. Mágneses félvezetők,
- II. Molekuláris elektronika,
- III. Mezoszkópikus és alacsony dimenziójú vezetők és mágnesek
- IV. Hálózatok és szemcsés rendszerek.

Az I., II. és III. az EU 7. Keretprogram *Nanoszerkezetek fizikája* témacsoport „Nanotudományok és Nanotechnológiák” területéhez kapcsolódik. A IV. téma az MTA „Természettudományi Prioritásai” közé tartozik. A 2007-ben új témaként indult *Spinjelzett molekulák mozgásának vizsgálata szilárdtestfizikai módszerekkel* interdiszciplináris téma.

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

Kiterjedt kutatásokat végeztek a *mágneses félvezetők* területén. A III-Mn-V típusú félvezetőkben egy ferromágneses fázis lép fel a kritikus hőmérséklet alatt és a rendszer mágneses vezetőként viselkedik. A jelenségkör iránti érdeklődést világszerte a potenciális spintronikai alkalmazások motiválják: ha a félvezető technológiák kiterjeszhetővé válnak mágneses rendszerekre, új elven működő nanoelektronikai eszközök jelenhetnek meg. A vizsgálatokhoz új, nagy stabilitású Andreev spektroszkópia mintatartót fejlesztettek ki, amely lokális spin-polarizáció méréseket tesz lehetővé nanométeres méretskálán. Mérték egyes mágneses félvezetők spin-polarizációját, lokális mágnesezettséget mutattak ki a Curie hőmérséklet felett is. Vizsgálták az ún. ballisztikus – diffúzív átmenetet.

A nanoszerkezetek legkisebb egységeinek, az atomi méretű objektumoknak vizsgálata a *molekuláris elektronika* irányába mutat. A kutatócsoportban – hazánkban úttörő módon – egyatomos pont-kontaktusokat és atomláncokat állítanak elő. Az vizsgálatok során a hidrogén molekulák kölcsönhatását határozzák meg szupravezető elektródákkal. Kiemelésre érdemes a molekuláris kontaktusokban észlelt óriási negatív differenciális ellenállás.

A *szén-nanocsövek* nanométer átmérőjű, nagy mechanikai szilárdságú elektromos vezetők és félvezetők. A legfontosabb potenciális alkalmazás a nanoelektronika. A nanocsövek elektromos és mágneses tulajdonságait finomhangolták a nanocsövekbe töltött paramágneses anyagokkal, illetve alkáli dópolással.

Mágneses nanorészecskéken, illetve *mágneses klasztereken* tanulmányozták azt a mind elméleti, mind gyakorlati szempontból fontos kérdést, hogy miként változnak a mágneses anyagok tulajdonságai a méret függvényében. A modellrendszer a polioxomolibdátok családja, melynek építőkövei önszervező módon kapcsolódnak egymáshoz. Elektron spin rezonancia módszerrel meghatározták egy tipikus rendszer mágneses paramétereit.

A *mezoszkópikus rendszerek* elméletében fontos eredmény, hogy numerikus renormalizációs csoport transzformáció segítségével megoldották a Kondo árnyékolási felhő problémáját a ferromágneses kontaktusokhoz csatlakozó kvantum pöttyökre. Elméletet dolgoztak ki a kvantum-szennyezőkön történő rugalmatlan szórásra. Kidolgozták mezoszkópikus fémes rendszerekben található szennyezők felületi anizotrópiájának elméletét.

Az ESR spektroszkópia kiterjesztése a nagyfrekvenciás méréstartományba a biofizikai kutatások számára különleges lehetőségeket nyújt. A módszerrel spin jelzett molekulák mozgását más technikákhoz képest (NMR, konvencionális ESR) lényegesen rövidebb időtartományban követhető. A sejtmembránok összetett mechanizmusának megértését szolgáló, lipidekből és fehérjékből álló ún. modellmembrán rendszerek tanulmányozását kezdték el. A 2007-ben indult téma keretében a vizes spinjelzett anyagok ESR spektroszkópiái előkísérleteit végezték.

A szemcsés anyagok mindenütt jelen vannak és technológiai szerepük óriási, tanulmányozásuk az utóbbi másfél évtizedben lendült fel a számítási lehetőségek látványos javulásának köszönhetően. A munka során számítógépes leírást adtak szemcsés rendszerekben a torlódási küszöb közelében a dinamikus viselkedésről. Megalkották a súlyozott hálózatokban kialakuló közösségek modelljét.

Fontos előrelépést jelent a kísérleti munka szempontjából, hogy a 2007 év során, elsősorban OTKA és Európai Unió pályázat támogatással, felújították a mágneses vizsgálatokra szolgáló mm-hullámú nagyfrekvenciás elektron spin rezonancia berendezést, amelynek érzékenysége a tesztek szerint lényegesen javult.

A Nanotudományok és Nanotechnológiák témacsoporton 12 kutató dolgozott (6 fő AKCs), 50 M Ft körüli összes, 30 M Ft AKCs ráfordítással, a szemcsés anyagokon 3 fő (1 fő AKCs) 15 M Ft összes, 4 M Ft AKCs ráfordítással dolgozott.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

A tudományos kutatásban együttműködnek az élvonalbeli hazai és nemzetközi kutatólaboratóriumokkal. Az együttműködések között kiemelt szerepet játszik az MTA kutatóintézeteivel kialakított szoros munkakapcsolat. 2007 folyamán az MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézetével, az MTA Részecske és Magfizikai Kutató Intézetével, az MTA Kémiai Kutatóközponttal és Szegedi Biológiai Központtal volt közös kutatási program. Számos fontos külföldi laboratóriummal végeztek közös kutatást. Mágneses félvezetők területén a University of Notre Dame, Egyesült Államok és a University of Tokyo, Japán, a szén nanocsövek területén a Bécsi Egyetem és az Ecole Polytechnique Federale Lausanne (Svájc) kutatóival folytatott együttműködés emelhető ki.

A kutatócsoport két tagja hosszabb tanulmányúton vesz részt a University Karlsruhe, Ludwig-Maximilians-University München (Németország) egyetemek elméleti kutató csoportjaiban. Az elméleti kutatások területén szoros kapcsolat alakult ki a Helsinki University of Technology (Finnország), University of Palermo (Olaszország), Rutgers University, Harvard University (Egyesült Államok), University of Cologne, (Németország), University Paris Sud (Franciaország) kutatóival.

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport tagjai számos kutatási pályázatot vezetnek illetve pályázat résztvevői. A pályázatok közül kettő 2007 végén lezárult (Spin and charge dynamics in solids and nanostructures; Elektron transport in nanojunctions) és további számos pályázat feladatain folyamatosan dolgoznak. A „Multifrekvenciás elektron spin rezonancia erősen korrelált fémekben és szupravezetőkben” NK OTKA pályázat teljesítése a kutatási tervnek megfelelően alakul, a modernizált ESR spektrométer tesztjei szerint a berendezés jól működik. A lezáruló pályázatok eredményeire építve sikeresen pályáztak „Spin-polarizáció nanoszerkezetekben” címmel nagyösszegű OTKA kutatási (NK) pályázatra. A pályázat keretében nanoszerkezetek spin-polarizációjának lokális vizsgálatát tervezik pásztázó Andreev mikroszkópia fejlesztésével. Molekuláris elektronika ill. mágneses optikai spektroszkópia témakörökben 2008 februárjában nyújtottak be OTKA kutatási pályázatokat.

A szén nanocsövek kutatására benyújtott ERC Starting Grant pályázat 0.5 mFt támogatást nyert az MTA elnöki keretből.

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

1. Simon F, Murányi F, Fehér T, Jánossy A, Forró L, Petrovic C, Bud'ko SL, Canfield PC: Spin-lattice relaxation time of conduction electrons in MgB<sub>2</sub>. Phys. Rev. B 75: 024519 (2007)
2. Zolyomi V, Simon F, Rusznyak A, Pfeiffer R, Peterlik H, Kuzmany H, Kurti J: Inhomogeneity of <sup>13</sup>C isotope distribution in isotope engineered carbon nanotubes: Experiment and theory. Physical Review B 75: 195419 (2007)
3. Dóra B, Gulácsi M, Simon F, Kuzmany H: Spin gap and Luttinger liquid description of the NMR relaxation in carbon nanotubes. Physical Review Letters 99: 166402 (2007)
4. Jánossy A, Nagy KL, Fehér T, Mihály L, Erb A: Search for Stripes in Lightly Hole Doped YBCO by ESR and IR Transmission. Physical Review B 75: 024501 (2007)
5. Kumpula JM, Onnela JP, Saramaki J, Kaski K, Kertész J: Emergence of communities in weighted networks. Physical Review Letters 99: 228701 (2007)
6. Shaebani MR, Unger T, Kertész J: Unjamming of granular packings due to local perturbations: Stability and decay of displacements. Physical Review E 76: 030301 (2007)
7. Ujsaghy O, Szunyogh L, Zawadowski A: Revised theory of the magnetic surface anisotropy of impurities in metallic mesoscopic samples. Physical Review B 75: 064425 (2007)
8. Borda L, Vladár K, Zawadowski A: Theory of a resonant level coupled to several conduction electron channels in equilibrium and out-of-equilibrium. Physical Review B 75: 125107 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	8,9	Ebből kutató <sup>2</sup> :	5,3
PhD, kandidátus: 6	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 4
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			7
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			16
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		16
nemzetközi együttműködés keretében: 13	SCI által regisztrált folyóiratban:		16
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 48,413	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		278
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:	216		
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> : 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Értékesített szabadalmak száma:	0		
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 12			posztterek száma: 4
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			15
Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 0	Doktori iskolát vezetőik száma:		0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> : 0	Gyakorlati kurzusok száma:		0
TDK munkát készítő hallgatók száma: 5	Diplomamunkát: 9	PhD-t:	12
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			1864
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			37 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> : 2	Teljes saját bevétel:		56,7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			12
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			56,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## BME MŰSZAKI ANALITIKAI KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Horvai György, az MTA levelező tagja

1111 Budapest, Gellért tér 4.

Telefon: 463-4056, Fax: 463-3408

e-mail: george.horvai@mail.bme.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A 2007–11 időszakra a csökkenő bérkeret miatt meg kellett válniuk több kiváló munkatárstól. A kutatócsoporttal eddig is szorosan együttműködő kollégák közül többen is csatlakoztak közreműködőként a kutatócsoport munkájához. Kitűzött feladataik voltak 2007-ben:

- Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése
- Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások.

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

*Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése*

Gazda-vendég rendszerek szenzorok előállításához optikai szenzorok fejlesztésével kapcsolatosan vizsgálták kromofor és fluoreszcens csoportokkal kapcsolt tiakalix[4]azakorona és koronaéter vegyületek spektroszkópiai viselkedését acetonnitriles közegben. Meghatározták a szenzormolekulák különböző fémionokkal alkotott komplexeinek sztöchiometriáját és stabilitási állandóját. Megállapították, hogy a BODIPY fluoroforral közvetlenül kapcsolt tiakalixkoronaéter molekula átmeneti fémionokra, elsősorban rézionokra szelektív. E vegyület fluoreszcenciás viselkedését az ún. PET (fényindukált elektronvándorlás) mechanizmus alapján értelmezték. A nagyérzékenységű és fotostabil fluoreszcens rézion szelektív szenzor affinitás típusú kölcsönhatások nagyérzékenységű detektálása szempontjából ígéretes.

Molekuláris lenyomatú polimerek előállítása és jellemzése: Kísérletekkel és számítógépes szimulációval bizonyították a molekuláris lenyomatú polimerek (angol rövidítés: MIP) jellemzésére elterjedten használt kromatográfiás módszerek alkalmatlanságát.

A MIPEk előállítására használt gamma-polimerizációs folyamat kinetikáját kimérték.

Felületen imprintelt MIP mikrorészecskéket állítottak elő poli(3,4-etilénoksi-ditiofén) polisztirolszulfonsav (PEDOT/PSS) vezető polimerből. A mikrorészecskéket egy polikarbonát membrán szűrő szabályos, 8 µ-os henger alakú pórusaiba növesztették elektrokémiai polimerizációval. A pórusok falára előzőleg fehérjét adszorbeáltattak. A polimerizáció befejeztével a membránszűrőt leoldották, miáltal mikronméretű, a felületükön a fehérje lenyomatát tartalmazó PEDOT részecskéket nyertek. Ezek a lenyomatképzésnél használt fehérjét nagy szelektivitással kötötték vissza. A PEDOT MIP-ek tovább miniatürizálhatók, kémiai szenzorok építhetők belőlük, pl. felületi plazmon rezonancia v. kvarc kristály mikromérleg készülékhez kapcsolva érzékelő réteggé. Mivel vizes közegben működnek, alkalmasak lehetnek biológiai minták mérésére.

Ciklodextrin zárványkomplexek tanulmányozása: Gazda-vendégmolekuláris szupramolekuláris rendszereket állítottak elő és vizsgálták termoanalitikai sajátosságait és eltarthatóságukat. A munka célja gyógynövényekből nyert alkoholos extraktumok illékony komponenseinek stabilizálása volt lineáris és ciklikus dextrinek felhasználásával.

Másodlagos kötőerők szerepének tanulmányozása szilárd anyagokban: Gyógyszerhatóanyagok átkristályosítása során keletkező hatóanyag-oldószer szupramolekuláris rendszerek, csatornavegyületek termoanalitikai viselkedését és oldószer vesztesét tanulmányozták, leírták a bomlási folyamatok kinetikáját.

### *Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások*

Szelektív megkötésre alkalmas ligandumokat alkalmazó szenzorok: Optikai szenzorkutatásaik másik iránya fluoreszcens cink ionszelektív szenzorok fejlesztése, elsősorban az ionos cink biológiai szerepének a tisztázása és mennyiségének biológiai mintákban való nagyérzékenységű meghatározása iránti igény kielégítésére. A cinkionok szub-mikromólos tartományban való jelzésére optikai cink ionszelektív szenzort fejlesztettek ki. Új biszkarboxamid típusú ionoforokat állítottak elő, melyek közül a naftil-csoporttal kapcsolt biszkarboxamid molekula bizonyult szenzor- molekulaként a legígéretesebbnek. A felhasználásával készített optikai érzékelő a cinkionokat a  $3 \cdot 10^{-11}$  és  $1 \cdot 10^{-8}$  M tartományban detektálja. A szenzor biológiai alkalmazás szempontjából ígéretes.

Toxikus fémek nagyérzékenységű meghatározására és speciációs vizsgálatára módosított voltammetriás bizmutfilm elektródot és stripping voltammetriás módszert fejlesztettek ki. Az elektródmódosításra 2,2'-dipiridilt, és originális, piperidin-kalixarén származék ionofort használtak. A bizmutfilm elektród kiküszöböli a környezetre veszélyt jelentő higanyt, mint elektródanyagot. A módosítása pedig növeli a szenzor érzékenységét és szelektivitását. E módszerrel élelmiszerminták nehézfémion tartalmát határozták meg sikerrel. (2 konferencia előadás és 1 dolgozat)

Bizmutfilm munkaelektrod alkalmazásával elektroanalitikai módszert dolgoztak ki két víz-oldható neonikotinoid növényvédőszer mennyiségi meghatározására. A kidolgozott eljárás javasolható, mint egy környezetbarát „screening” módszer a növényvédőszeres fotokatalitikus bomlásának nyomkövetésére. (1 konferencia előadás és 1 dolgozat)

Szelektív transzporton alapuló nanoszenzorok: Nano-bioszenzorokat alakítottak ki DNS analízisre. Az általuk elsőként kidolgozott eljárás során a nanopórusos membránokban kialakított, szabályos alakú, arany nanocsövek belső falához kovalens kötéssel szelektív molekuláris felismerésre alkalmas, elektromosan semleges DNS analógokat, peptid-nukleinsavakat rögzítettek. A komplementer DNS szál bekötődése esetében kialakult kettős csavar megváltoztatja a nanocső átmérőjét és a belső felület elektromos töltését, amely viszont a befolyásolja a nanocső átjárhatóságát különböző ionok számára. A DNS nanoszenzor konstrukció bármilyen jelölés használata nélkül is alkalmazható kvantitatív DNS analízisre. Nem-specifikus adszorpció a nem-komplementer DNS szálak esetében nem történt. Munkájuk 2007 júniusában jelent meg.

Folyadékok határfelületi jelenségeinek számítógépes modellezése: Új módszerrel írták le a metanol-víz elegyek határfelületén a molekulák orientációs eloszlását különböző hőmérsékleteken. Módszerüket több jelentős nemzetközi kutatóhely átvette és továbbfejleszti.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

*Nemzetközi téren* a Kutatócsoport kapcsolatai erősek. A Kutatócsoport két közreműködő kutatója a zürichi ETH, illetve a Cambridge-i Egyetem professzora. A Kutatócsoport tagjai számos nemzetközi kutatási projektben vesznek részt. A csoport kutatói nemzetközi (és hazai) konferenciák szervezésében is aktívak.



A Magyar és Északi Tudományos Akadémiák közötti kétoldalú együttműködésben: Eljárást dolgoztak ki aminosavak enantioszelektív felismerésére alkalmas molekuláris lenyomatú vezető polimerek elektroszintézisére. (elfogadva, *Electrochimica Acta* IF: 2.955); Új eljárást dolgoztak ki szintetikus ellenanyagok fejlesztésére molekuláris lenyomatok képzésével elektropolimerizációval előállított polimer nanorudak (80 nm átmérőjű és 13 mikrométer hosszú) felszínén. Marie Curie projekt keretében kutatási együttműködést folytatnak hét európai kutatóhellyel és három céggel. Kutatási együttműködésben vettek részt három brazil egyetemmel: Natali Egyetem (Rio Grande do Norte): Biodízel olajok szintéziséhez használatos katalizátorok előállítása és termikus stabilitásuk jellemzése. Biodízelolaj minták termikus stabilitásának vizsgálata, összehasonlító elemzése. Sao Paulói Állami Egyetem Sao Carlosban működő Kémia Intézetével: Gyógyszerhatóanyagok termikus fragmentációjának, illetve a hőközlés hatására beövetkező intramolekuláris átrendeződés vizsgálata, a bomlástermékek azonosítása TG-MS módszerrel. Sao Paulói Állami Egyetem Riberiao Preto-ban működő Gyógyszerészeti Intézetével: Gazda-vendégmolekula szupramolekuláris rendszerek előállítása, termoanalitikai sajátosságuk és eltarthatóságuk vizsgálata. Továbbá folyamatos együttműködést folytatnak az alábbi partnerekkel: Pécsi Tudomány Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék; Veszprémi Pannon Egyetem; Abo Akademy University, ABO-Turku (FI); University of Cambridge, Institute of Biotechnology GB); University of Athens, Athens (Greece); Memphis University; Oktatás egyetemeken: a csoport minden tagja aktívan oktat.

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Chemically Modified Synthetic Nanopores For Label-Free Detection Of Biomolecular Interactions, OTKA (NF pályázat); Mycotoxin és allergén fehérje specifikus aptamerek izolálása és alkalmazása, OTKA (K pályázat); Molekuláris lenyomatot tartalmazó polimerek vizsgálata, OTKA (K pályázat); Nanomaterials for Application in Sensors, Catalysis and Emerging Technologies, EU (Marie Curie); Szintetikus receptor alapú kémiai szenzorok fejlesztése, tanulmányozása, OTKA; Molecular Catalysis and Photocatalysis at Soft Interfaces: Towards chemical fuel cells (COST pályázat)

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

1. Toth B, Pap T, Horvath V, Horvai G: Which molecularly imprinted polymer is better?, *Analytica Chimica Acta* 591(1): 17–21 (2007)
2. Jágerszki G, Gyurcsányi RE, Höfler L, Pretsch E: Hybridization-Modulated Ion Fluxes through Peptide-Nucleic-Acid- Functionalized Gold Nanotubes. A New Approach to Quantitative Label-Free DNA Analysis., *Nano Letters* 7(6): 1609–1612 (2007)
3. Martins AD, Craveiro AA, Machado MIL, Raffin FN, Moura TF, Novák Cs, Éhen Zs: Preparation and characterization of Mentha x villosa Hudson oil-beta-cyclodextrin complex, *Journal Of Thermal Analysis And Calorimetry* 88(2): 363–371 (2007)
4. Babec AT, Kádár M, Tóth K, Bitter I: Nafion-Calixarene Composite Film Modified Glassy Carbon Electrode for Adsorptive stripping Analysis, *Sensing in Electroanalysis In: Sensing in Electroanalysis* (Ed. Vytras K, Kalcser K), University of Pardubice, Pardubice, pp 159–169 (2007)
5. Partay L, Jedlovsky P, Horvai G: Temperature dependence of the structure of the liquid-vapour interface of aqueous methanol solutions, *Journal Of Molecular Liquids* 134(1-3): 111–119 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	3	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3,5
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	1
		rendes tag:	1
			0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			34
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			33
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	31
nemzetközi együttműködés keretében:	3	SCI által regisztrált folyóiratban:	31
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	87,319	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	332
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			297
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	1
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	8	posztterek száma:	5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	2	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	8	Gyakorlati kurzusok száma:	8
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	10
			691
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			20 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	43,1 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,2 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	11 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			7
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	11,9 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## BME SZERVES KÉMIAI TECHNOLÓGIA TANSZÉKI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Faigl Ferenc, az MTA doktora

1111 Budapest, Budafoki út 8.

Telefon: 463-3652, Fax: 463-3648

e-mail: ffaigl@mail.bme.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A pályázati anyagban rögzített munkatervnek megfelelően, 2007-ben a kutatócsoport tagjai az alábbi feladatok megoldásán dolgoztak:

- Enantioszelektív reakciók kutatásához új pirrol- és pirrolidingyűrűt tartalmazó királis vegyületek szintézisének kidolgozása,
- Optikai izomerek elválasztási módszereinek kutatása, különös tekintettel új, P-kiralitással rendelkező heterociklusok rezolválásának megoldására,
- Szelektív katalitikus reakciók kutatása,
- Szelektív funkcionálizálás – gyógyszer intermedierek előállítása, elsősorban azometinilidek cikloaddíciós és elektro ciklizációs reakcióinak felderítésével.

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

Az új, pirrol-, illetve pirrolidingyűrűt tartalmazó királis vegyületek szintézisének kulcsintermedierjeit regioszelektív dimetallálást követő széndioxidos reakcióval állították elő, majd három új, racém dikarbonsav enantiomerjeit sóképzéssel rezolválással választották szét. A félészter-félsav származékokból számos új, optikailag aktív bifunkciós vegyületet szintetizáltak speciális borános redukciós lépések felhasználásával. Enzimatis rezolválással új, optikailag aktív oxirán-származékokat állítottak elő és ezekből fémorganikus reagensek jelenlétében optikailag aktív oxetán- és *cisz*-but-2-én-1,4-diol származékokat készítettek. A megfelelően helyettesített oxetánok katalitikus hidrogénezését követő gyűrűzárással új, 3,4-diszubsztituált-pirrolidinhez jutottak. Emellett számos új regioszelektív metallálási reakciót vizsgáltak ipari megbízás keretében. A projekten a kutatócsoport vezetőjének irányításával egy, a csoportba tartozó tud. főmunkatárs és két doktoráns, valamint egy technikus dolgozott, a kutatások pénzügyi fedezetét egy OTKA pályázat (2,25 M Ft) és egy ipari megbízás bevételének egy része (6 M Ft) biztosította.

Az optikai izomerek elválasztási lehetőségeinek kutatását elsősorban királis foszforatomot tartalmazó heterociklusok körében folytatták. A kutatócsoport oldatta meg az irodalomban elsőként borkősav származékokkal (TADDOL, SPIROTADDOL) a racém 1-szubsztituált-2-metil-3-foszfóln-1-oxid (az 1-helyen aril-, alkil- és alkoxi-csoportokkal szubsztituált) származékok rezolválását diasztereomer molekulakomplexek elválasztásával. A nagy hatékonyságú új rezolválási módszer feltalálói szabadalmi bejelentéssel is biztosították a szellemi termékhez fűződő jogukat. A hasonló molekulaszervezetek kedvező hatását kihasználva sikerült különböző természetes és természetben nem előforduló aminosavszármazékokat is rezolválni. A projekten két MTA-csoport tag, két hallgató és két egyetemi alkalmazott dolgozott. Az új, optikailag aktív foszfóln oxidok konfigurációjának meghatározásában az MTA KK szerkezetkutatói vettek részt. A projekt pénzügyi fedezetét főleg OTKA pályázatból (1,5 +0,5 M Ft) biztosították.

A szelektív katalitikus reakciók kutatásához kapcsolódóan vizsgálták cinkonidin sók és cukor alapú lariaterek aszimmetrikus indukciós hatását fázistranszferkatalitikus reakciókban. Tanulmányozták a katalizátorméreg típusú vegyületek heterogén katalitikus hidrogénezési lehetőségeit. A munkában két MTA kutató vett részt két egyetemi és egy ipari szakember közreműködésével. A kutatásokat OTKA pályázatból (0,5 M Ft) és ipari megbízásból (4 M Ft) finanszírozták.

A gyógyszeripari és finomkémiai felhasználást célzó szelektív funkcionálizálási módszerek kutatásához kapcsolódóan vizsgálták a terpiridin egységet tartalmazó, várhatóan biogén bázisok szelektív felismerésére képes, makrociklusok szintézisét is. Folytatták a nagy hatékonyságú új szintetikus módszerek fejlesztését azometin-ilidek felhasználásával. Így kidolgozták a pirrolo[2,1-*a*]izoquinolinok tandem 1,5-electrociklizációs – oxidációs reakciókon alapuló szintézisét, hidroxipirrolidinek előállítását. A munkában két MTA csoport tag mellett egy doktoráns és néhány diplomamunkát készítő hallgató vett részt. A kutatásokat főleg ipari megbízásokból finanszírozták (6 M Ft).

A csoport prémiuméves kutatója folytatta a textilszínezékek fotobomlási mechanizmusának feltárását célzó vizsgálatokat, az eredményeket nemzetközi és hazai folyóiratokban publikálták.

A felsorolt kutatási eredményeket a tárgyévben több gyógyszeripari K+F feladat megoldásaiban is hasznosították. Az új vegyületek egy része biológiai tesztekben került felhasználásra, a kidolgozott eljárások pedig klinikai kipróbálásra szánt vegyületek hatékony előállításához járultak hozzá, így biztosítva a csoport munkájának mielőbbi gyakorlati hasznosulását.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

A kutatócsoport minden tagja együttműködésben dolgozik a befogadó BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék oktatóival és kutatóival és intenzíven részt vesznek a tanszék oktatómunkájában előadások és gyakorlatok tartásával, TDK-zó, diplomamunkát készítő hallgatók témavezetésével. A szekezetmeghatározásokhoz elengedhetetlen spektroszkópai háttérrel a BME Szervetlen és Analitikai Tanszékével és az MTA Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémia Intézetével kialakított együttműködés biztosítja.

A beszámolási időszakban az EGIS (Servier) a Chinoin (Sanofi-Aventis) és a Richter Gedeon Rt-vel kötött K+F szerződéses munkákban vettek részt a csoport tagjai. A kifejlesztett nagy szelektivitású metallálási módszereket sikeresen hasznosították az Izotópintézet Kft részére kidolgozott „hideg” szintézisekben is.

A fémorganikus területen több éve sikeres együttműködést folytatnak a CNR Firenzei intézetével (Dr. Mordini, A), valamint közös Marie Curie pályázatot nyújtottak be olasz, francia, angol, német és lett kutatócsoportokkal. A pályázat az első bírálati fordulón sikeresen túljutott, a második fordulóban azonban forráshiány miatt elutasították. A kutatócsoport vezetője részt vesz az EU COST D40 akcióban („Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities”), mint a Management Committee magyar tagja. A kutatócsoport két tagja amerikai (Prof. Neghisi, E.) illetve angol (Prof. Groundwater, P.W) csoportokkal tartott fenn szakmai kapcsolatot.

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport tagjai témavezetőként és/vagy kutatóként öt OTKA pályázat teljesítésében vettek részt. Emellett sikeresen oldottak meg GVOP pályázatokhoz és hét ipari K+F szerződéshez kapcsolódó feladatokat.

Kiemelten sikeres az MTA kutatócsoport és a CNR (Firenze) közötti tudományos együttműködés: 2007-ben egy nemzetközi szerzői gárdát felvonultató szakkönyv szerkesztését végezték el közösen, a könyv a Springer kiadó gondozásában 2008 elején fog megjelenni. A korábbi nemzetközi együttműködések eredményeként az MTA csoport vezetője a COST D40 akció Management Committee tagjaként, 10 európai ország kutatócsoportjaival közösen vesz részt az új nagy szelektivitású katalikus reakciók kidolgozását célzó programban.

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

1. Faigl F, Thurner A, Farkas F, Battancs M, Poppe L: Synthesis and enantioselective rearrangement of (Z)-4-triphenylmethoxy-2,3-epoxybutan-1-ol enantiomers. *Chirality* 19, 197–202 (2007)
2. Pálovics E, Bereczki L, Marthy K, Pokol Gy, Faigl F, Fogassy E: Solvent dependency thought not solvate formation in the derivative-derivative resolution of N-formylphenylalanine. *Tetrahedron: Asymmetry* 18, 2531–2536 (2007)
3. Novak T, Ujj V, Schindler J, Czugler M, Kubinyi M, Mayer AZs, et al: Resolution of 1-substituted-3-methyl-3-phospholene 1-oxides by molecular complex formation with TADDOL derivatives. *Tetrahedron: Asymmetry*, 18, 2965–2972 (2007)
4. Bereczki L, Palovics E, Bombicz P, Pokol G, Fogassy E, Marthi K: Optical resolution of N-formylphenylalanine succeeds by crystal growth rate differences diastereomeric salts *Tetrahedron:Asymmetry* 18 (2), 260–264 (2007)
5. Novák T, Bakó P, Keglevich Gy, Greiner I: Enantioselective Phase Transfer Catalytic Reactions. A Comparative Study on the Use of Cinchonidine Salts and Glucose-Based Lariat Ethers Including Phosphin-oxidomethyl Derivatives Phosphorus, Sulfur, Silicon, 182, 2449–2456 (2007)
6. Tóth J, Nedves, A, Blaskó G, Dancsó A, Tőke L, Nyerges M: Synthesis of Pyrrolo[2,1-a]isoquinolines by a Tandem 1,5-Electrocyclisation – Oxidation Process Synthesis, 1003 (2007)
7. Víg A, Sirbiladze K, Nagy HJ, Aranyosi P, Rusznák I, Sallay P: The light stability of azo dyes and dyeings V. The impact of the atmosphere on the light stability of dyeings with heterobifunctional reactive azo dyes. *Dyes and Pigments* 7216–22 (2007)
8. Faigl F, Schindler J, Fogassy E: Advantages of structural similarities of the reactants in optical resolution processes, in *Novel Optical Resolution Technologies*, (editors: K. Sakai, N. Hirayama, R. Tamura) in the series of *Topics in Current Chemistry*, Vol. 269, Springer Berlin, Heidelberg, pp. 133–158 (2007)
9. Fogassy E, Keglevich Gy, Novák T, Schindler J, Ujj V: Királis foszforvegyületek és eljárás előállításukra. P070278. Magyar szabadalmi bejelentés

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			27
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			27
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	16
nemzetközi együttműködés keretében:	0	SCI által regisztrált folyóiratban:	16
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	37,454	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	199
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			165
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	9	posztterek száma:	8
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			9
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	1	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	8	Gyakorlati kurzusok száma:	4
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	6
			69
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			20 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	34 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,3 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			6
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	23,5 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## BME SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Vezető: Csiszár Imre, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Egry József u. 1.  
Telefon: 463-1101, Fax: 463-1677  
e-mail: balint@math.bme.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A beszámolási időszak a kutatócsoport tevékenységének kilencedik éve, egyben a harmadik pályázati ciklus kezdete. Az első két ciklusban elsősorban PhD előtt álló fiatalok kaptak lehetőséget a kutatócsoport keretében 1-2 évig a tudományos munkára, szakmai tapasztalatok szerzésére, kapcsolatok kiépítésére.

Az új pályázati ciklussal alapvetően új korszak kezdődött a kutatócsoport életében. Immár PhD-vel rendelkező, a tudományos pályán komoly eredményeket elért, nemzetközileg is ismert kutatók dolgoznak a kutatócsoport alkalmazásában, akik eredményeiket rangos nemzetközi fórumokon publikálják és adják elő. Ennek megfelelően most már a csoport kutatási eredményeinek is a korábbinál kisebb hányada esik a csoport vezetőire, és nagyobb a többi tagra. Természetes azonban, hogy az új tagoknak a csoport keretében végzett munkája még csak kis részben jelent meg mint publikáció.

A kutatócsoport keretében – a pályázatnak megfelelően – négy fő területen folyik alap kutatás: Kölcsönható részecske-rendszerek aszimptotikus vizsgálata, Dinamikai rendszerek sztochasztikus viselkedése, Pénzügyi matematika, valamint Információ-elméleti módszerek a matematikai statisztikában.

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

#### *Kölcsönható részecske-rendszerek aszimptotikus vizsgálata*

Konstrukciót adtak a nulla hatótávolságú egydimenziós kölcsönható részecske-rendszereket leíró sztochasztikus folyamatokra, valamint az úgynevezett "kőműves" folyamatra a teljesen aszimmetrikus, attraktív esetben. Az eredmény újszerűsége abban áll, hogy megengedi az ugrási ráták exponenciális növekedését, míg a korábbi konstrukciók legfeljebb lineáris növekedés esetén működtek. Egyúttal szorzat-mértékek egy természetes családjáról megmutatták, hogy invariáns és extrémális. Az extrémalitást a korábbiaknál egyszerűbb eljárással sikerült bizonyítani. [1] (kutatói team létszáma: 4 fő, ebből a kutatócsoportban: 1 fő)

Attraktív, közvetlen szomszéd típusú kölcsönható részecske-rendszerek egy nagy családjára érvényes egzakt formulákat találtak a részecskeáram fluktuációi, illetve a rendszer kétpont-függvénye és a másodosztályú részecske mozgása közötti összefüggés jellemzésére. A vizsgált osztályba beletartozik az aszimmetrikus egyszerű kizárási, a nulla hatótávolságú, a kőműves, és a szimmetrikus K-kizárási folyamat is. Eddig ilyen kapcsolat csak az egyszerű kizárási folyamatra volt ismert, ahol nagyon hasznosnak bizonyult a részecskeáram fluktuációinak vizsgálatában. [2] (kutatói team létszáma 2 fő, ebből a kutatócsoportban 1 fő)

Teljes gráfon alapuló statisztikus mechanikai rendszerek egy nagy családját sikerült kiterjeszteni végtelen felcserélhető folyamattá. Ennek segítségével a ferromágneses Curie-Weiss Ising modellre ismert eredmények kiterjeszthetővé váltak a ferromágneses Curie-Weiss Potts és Curie-Weiss Heisenberg modellekre is. Ennek kapcsán vizsgálták a ferromágnesség

szerepét, és az antiferromágneses Curie-Weiss Ising modell kiterjeszhetőségét. [7] (kutatói team létszáma 3 fő, ebből a kutatócsoportban 1 fő)

#### *Dinamikai rendszerek sztochasztikus viselkedése*

Vizsgálták egy megjelölt részecske diffúzióját az egydimenziós Rayleigh-gázban az  $M \rightarrow 0$  határesetben. Így a diffúzió egy új modelljéhez jutottak, ahol a két középső részecske között Calogero-Moser-Sutherland típusú (egy per távolságnégyzetes) potenciálú kölcsönhatás van. Ennek az új modellnek a számítógépes szimulációja során a megjelölt részecske helyének aszimptotikus szórásnégyzete pontosan annyinak bizonyult, mint amit korábbi szerzők az eredeti dinamika  $M \rightarrow 0$  határesetében találtak. Így a numerikus vizsgálatok cáfolják az aszimptotikus szórásnégyzet nem-folytonos voltára vonatkozó korábbi sejtéseket. [3] (kutatói team létszáma 3 fő, ebből a kutatócsoportban 2 fő)

#### *Pénzügyi matematika*

Részvényárfolyamok keresztkorrelációját vizsgálták dekompozíciós módszerrel, amit korábban arra használtak, hogy az adatok véges felbontásának hatását vizsgálják a korrelációs együttthatóra (ún. Epps effektus). Egy Brown-mozgásra és memória nélküli felújítási folyamatra (vagyis Poisson pontfolyamatra) épülő egyszerűsített modell segítségével megmutatták, hogy analitikus kezelhetőség esetén pontos eredményt kapnak a frekvenciafüggésre. Az eredmények arra utalnak, hogy az Epps effektus a késleltetett korrelációk véges – az aktivitással nem skálázódó – lecsengési idejének a következménye. A karakterisztikus idő egy emberi időskálához kötődik, mert időre van szükség a hírekre való reagáláshoz. [6] (kutatói team létszáma 3 fő, ebből a kutatócsoportban 1 fő)

#### *Információ-elméleti módszerek a matematikai statisztikában*

Átfogó megoldást adtak a többlépcsős Markov-láncok memóriahosszának univerzális becslésére vonatkozó problémákra. A memóriahossz az a legkisebb  $K$  szám, amire igaz, hogy a folyamat jövője a múlttól csak az utolsó  $K$  állapotokon keresztül függ. A szóban forgó probléma ennek a  $K$ -nak a meghatározása a folyamat egy realizációjának megfigyelésével a nulla időponttól kezdve. Az eredmények véges és megszámlálhatóan végtelen ábécéjű Markov-láncokra vonatkoznak. [8] (kutatói team létszáma 2 fő, ebből a kutatócsoportban 1 fő)

Elemzést adtak a diszkrét idősorok szekvenciális becslésére és jóslására vonatkozó problémákról. Régóta ismert, hogy egy stacionárius sztochasztikus folyamat megfigyelésével nem lehet az (utolsó  $n$  állapotra vonatkozó feltételes) átmenet-valószínűséget univerzálisan becsülni úgy, hogy az majdnem biztosan a tényleges átmenet-valószínűséghez tartson. Ennek ellenére, folyamatok bizonyos korlátozott osztályaira, vagy bizonyos megállási idők alkalmából adott becslések sorozata esetén, sikerült univerzális becslést találni. [9] (kutatói team létszáma 2 fő, ebből a kutatócsoportban 1 fő)

Egy, a többszörös hozzáférésű kommunikációs csatornák elméletét és gyakorlatát tárgyaló átfogó könyv első fejezetében levezették a kapacitástománnyt két küldő és egy fogadó esetére. [4] (kutatói team létszáma 2 fő, ebből a kutatócsoportban 1 fő)

Kvantum kommunikációs csatornák vizsgálata során entrópia-egyenlőtlenségek és kvantum nagy számok törvénye segítségével sűrűség-mátrixok esetére bebizonyítottak egy közelmúltbeli sejtést, miszerint Neumann-entrópiák bizonyos különbségei a relatív entrópiához tartanak, amint a rendszer mérete végtelenhez tart. Ennek kapcsán bevezették az egységnyi költségre eső csatornkapacitás fogalmát klasszikus-quantum csatornákra. Bináris



bemeneti ábécéjű csatornákra ez a kapacitás egyenlőnek bizonyult a relatív entrópiával. Ebből a sejtés egy második bizonyítása és új értelmezése adódott. Mindkét megközelítés a sejtés általánosításához vezetett. [5] (kutatói team létszáma 3 fő, ebből a kutatócsoportban 1 fő)

A társadalmi-gazdasági hasznosságról: az említett kutatások mindegyike alapkutatás.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

A kutatócsoport tagjai kiterjedt kapcsolatokkal rendelkeznek a következő hazai matematikai műhelyekkel: MTA Matematikai Kutatóintézete, ELTE Matematika Tanszékcsoportjai, MTA SZTAKI.

A csoport tagjainak nemzetközi kapcsolatai is számottevőek. Hangsúlyosan kiemelkedőek a franciaországi (Paris, Orsay), hollandiai (Amsterdam, Eindhoven), izraeli (Jeruzsálem) és USA (Atlanta GA, Birmingham AL, Madison WI) kapcsolatok.

### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A tárgyévben a kutatócsoport tagjai az alábbi OTKA pályázatokban érintettek: T46376, T46187, TS49835, K60708, NK63066, F67729. Ez utóbbi a csoport egyik új tagjának önálló pályázata. A csoport egy tagja az ERC Starting Grant pályázatáért az MTA Elnöki Keretből 500.000 Ft támogatást kap.

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

1. Balázs M, Rassoul-Agha F, Seppalainen T, Sethuraman S: Existence of the zero range process and a deposition model with superlinear growth rates, *Annals of Probability* 35(4): 1201–1249 (2007)
2. Balázs M, Seppalainen T: Exact connections between current fluctuations and the second class particle in a class of deposition models, *Journal of Statistical Physics* 127(2): 431–455 (2007)
3. Bálint P, Tóth B, Tóth P: On the zero mass limit of tagged particle diffusion in the 1-d Rayleigh gas, *Journal of Statistical Physics* 127: 657–675 (2007)
4. Csiszár I, György A: Multiple access channels In: Multiple access channels (Ed. Biglieri E, Györfi L), IOS Press, 2007, pp 3–17
5. Csiszár I, Hiai F, Petz D: Limit relation for quantum entropy and channel capacity per unit cost, *Journal of Mathematical Physics* 48(9): 092102 (2007) [5]
6. Kertész J, Tóth B, Tóth B: Modeling the Epps effect of cross-correlations in asset prices, *Proceedings- Spie the International Society For Optical Engineering* 6601: 6601 0J (2007)
7. Liggett TM, Steif JE, Tóth B: Statistical mechanical systems on complete graphs, infinite exchangeability, finite extensions and a discrete moment problem, *Annals Of Probability* 35: 867–914 (2007)
8. Morvai G, Weiss B: On estimating the memory of finitarily Markovian processes, *Annales De L Institut Henri Poincare-Probabilites Et Statistiques* 43: 15–30 (2007)
9. Morvai G, Weiss B: On sequential estimation and prediction for discrete time series, *Stochastics And Dynamics* 7(4): 417–437 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Sztochasztika Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	3,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3,5
PhD, kandidátus: 4	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			6
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			6
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		6
nemzetközi együttműködés keretében: 4	SCI által regisztrált folyóiratban:		6
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 6,089	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		12
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			9
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> : 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0		<i>ebből</i> külföldön: 0	
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 10			posztterek száma: 0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 5		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 6	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 1		Doktori iskolát vezetőik száma: 0	
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> : 3		Gyakorlati kurzusok száma: 18	
TDK munkát készítő hallgatók száma: 2		Diplomamunkát: 1	PhD-t: 0
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			504
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			15 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> : 0		Teljes saját bevétel: 0 MFt	
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			10,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> : 0			A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból: 0		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt	
Egyéb: 0		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt	
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## **BME VÍZGAZDÁLKODÁSI KUTATÓCSOPORT**

Vezető: Somlyódy László, az MTA rendes tagja

1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Telefon: 463–1530, Fax: 463–3751

e-mail: somlyody@vkkt.bme.hu

### **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

A kutatócsoport a fenntartható vízgazdálkodás aktuális kérdéseivel foglalkozik: (a) Víz Keretirányelv hazai megvalósítása; (b) Éghajlatváltozás hatása a vízgazdálkodásra; (c) Árvizek levezetésének szabályozása a Tisza vízgyűjtőjén; (d) A vízszint változásának hatása a Balaton ökológiai állapotára; (e) Nem-pontszerű szennyezések vízgyűjtő léptékű meghatározása és (f) Áramlási holtterek szerepe a fitoplankton dinamikájában a Tisza folyón.

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

A kutatócsoport szorosan együttműködik a BME Vízi Közmű és Környezetmérnöki Tanszékével, amelynek keretében működik.

Az *EU Víz Keretirányelv* hazai alkalmazása több módszertani kérdést vetett fel. 2007-ben a vízgyűjtő-gazdálkodási tervek készítését segítő útmutatók kidolgozása folyt (szabályozott vízfolyások rehabilitációja, hajdani árterületek/holtágak revitalizációja, optimalizált intézkedések pontszerű és diffúz tápanyagterhelések szabályozására, a társadalmi egyeztetés folyamatának egyes módszertani elemei). A gyakorlati alkalmazásra a Tisza Kisköre feletti vízgyűjtőjén, esettanulmányok keretében került sor. Az elemzések a vízgyűjtő-gazdálkodási tervek 2009. decemberi határidőre való elkészítésének megalapozását jelentik. A projekt 2007. évi költségvetése alvállalkozók nélkül 19,3 M Ft volt. A munkában 5 fő vett részt, közülük a kutatócsoport tagja egy fő, egy fő pedig támogató tag.

Az *éghajlatváltozás* várható hatásairól készült egy tanulmány, amely összefoglalja az IPCC-jelentéseket, bemutatja a Kárpát-medencére érvényes legfrissebb előrejelzéseket és a vízháztartásra, valamint a vízhasználatokra gyakorolt várható hatásokat. A hőmérséklet és a csapadék várható változásai hatására a kisvízi felszíni lefolyás, a tavak egyensúlyi felülete és a beszivárgás akár 50%-kal is csökkenhet az évszázad második felére. A klíma mediterrán irányba tolódik el, növekednek a szélsőségek. A változások érintik a vízhasználatokat is: csökkenni fog az öntözésre fordítható vízmennyiség, kevesebb lesz az ivóvízellátásra hasznosítható felszín alatti vízkészlet, és romlanak majd a tározók feltöltődési viszonyai. A tanulmányt külső támogatónk készítette, megbízásra fordítható keretünk terhére.

Az *árvízi biztonság* növelése a vízgazdálkodás súlyponti feladata, különösen az utóbbi időben tapasztalt rekord jellegű szélsőséges események miatt. A cél korszerű árvízszabályozási stratégia megalapozása, és az erre alkalmas döntéstámogató rendszer kifejlesztése volt. A rendszer összekapcsolt osztott paraméterű területi lefolyási modellre és egy-, illetve két-dimenziós hidrodinamikai modellre épül. Felhasználásával meghatározhatók a töltések fejlesztési lépcsői, a szükséges hullámtéri beavatkozások, és kiválaszthatók a szükségeltározók és a mélyártéri tározás optimális helyszínei, figyelembe véve az éghajlatváltozás hatásait, az árvízi kockázatokat, a tározók üzemirányítását, és a tájgazdálkodás szempontjait. A témakörrel kapcsolatos munkák négy projekt keretében folytak. A felsorolt projektek 2007. évi alvállalkozó nélküli költségvetése 14,3 M Ft volt. A munkát a kutatócsoport vezetője és

egyik külső támogatója irányította, kidolgozásában 4 fő vett részt, ebben a kutatócsoportot 2 fő képviselte, mintegy 14 kutatóhónap mértékben.

A *Vízszintváltozás hatása a Balaton ökológiai állapotára* című projektben (NKFP-projekt: BALÖKO, vezető intézmény az MTA BLKI) a Tanszék a vízgyűjtő lefolyási és terhelési viszonyainak elemzésével, a tó vízháztartásának vizsgálatával, az áramlás és a fényviszonyok modellezésével, a nyíltvíz és a parti sáv élővilágának kutatásával foglalkozott. 25 éves időhorizontot és a legvalószínűbb éghajlati forgatókönyveket tekintve a lefolyás és tápanyagterhelés éves szinten kevéssé módosul, a változás főként a szezonális eltolódásban jelentkezik. A Balaton vízmérete pozitív marad, noha vízháztartásának érzékenysége az éghajlatváltozás előrehaladásával növekszik. Az élővilág a főbb társulásokra (fitoplankton, zooplankton, makrofiton) vonatkozó, egymást kiegészítő modellekkel jellemezhető: az algák esetében mérésekre alapozott két-dimenziós modell és populációdinamikai közelítésre épülő eljárás, a hínarakra pedig egyed alapú modell készült. A bioturbáció a jövőben szabálytalanabban jelentkeznek. A tó viszonylag kevéssé érzékeny a hínár-terjedésre és csak nagyon alacsony vízszintek mellett várható szignifikáns változás. A nádas kedveli a vízszintváltozást. A kutatás 2007. évi költségvetése alvállalkozók nélkül 34,3 M Ft volt. A kutatást a csoport vezetőjének irányításával hat kutató végezte, akik közül ketten a csoport külső támogatói, a tagok közül pedig három fő vett részt a kidolgozásban, összesen mintegy 16 kutatóhónap erejéig.

A *vízgyűjtők diffúz tápanyagterhelésének* meghatározására a hidrológiai ciklus háromdimenziós leírására képes, osztott paraméterű, dinamikus „ARES” modell a lebegőanyag és a szervespartikulált foszforterhelés számítására alkalmas eróziós almodullal egészült ki. A modell a lefolyási hierarchia szerint összekapcsolt cellákra az eróziós anyagáramot a felszíni csúsztatósebességből számítja. A kalibrálás és az igazolás a Zala Zalaapátinál mért napi adatai alapján történt. A vízgyűjtőn folytatott gazdálkodási gyakorlatban bekövetkező változások (művelési ág és mód, trágyázás) hatásának előrejelzésére készült az éves léptékű, osztott paraméterű „PhosFate” modell, amely anyagmérlegen alapuló hidrológiai, foszfor-forgalmi és transzportmodellt egyesít interaktív kezelő felülettel is rendelkező térinformatikai rendszerben. Elkészült a Zala, a Kapos és a Tisza Kisköre feletti vízgyűjtőjének talajveszteségi térképe, illetve az eróziós foszforterhelés szempontjából veszélyeztetett területek térképe. A modellezési munkák a Víz Keretirányelv megvalósításával, illetve a Balaton kutatásával foglalkozó projektek keretében zajlottak.

Az OTKA keretében végzett *tiszai fitoplankton kutatás* célja az áramlási holtterek szerepének tisztázása volt. A korábbi tapasztalatok felhasználásával 2007-ben a Szamos torkolata alatti szakaszon 3 olyan mérési szelvényben folytak vizsgálatok, ahol jelentősebb holtterek alakulhatnak ki. A szelvényeket különböző vízállások idején nagy térbeli felbontásban vizsgálva, jelentős mélység és kereszt-szelvény menti mozaikosság mutatható ki az élettelen környezetben és a fitoplankton bioturbációjában egyaránt, ami igazolta a vizsgálati módszerek érzékenységét. A legfontosabb következtetés azonban az volt, hogy a Tisza túlságosan nagy folyó ahhoz, hogy az áramlási holtterek hatása számottevő legyen, ezért a vizsgálatokat kisebb folyókon kell folytatni. A kutatásban a csoport két kutatója vett részt, mintegy 10 kutatóhónap mértékben. A támogatás 2007. évi összege 6,9 M Ft volt.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

A nemzetközi kapcsolatok egyik formája az EU-projektek (2007-ben 3 ilyen projekt - bővebben: melléklet) keretében megvalósuló közös munkavégzés, illetve a munkaüléseken

való részvétel. A kutatócsoport vezetője az European Environmental Agency Tudományos Bizottságának elnöke és tagja a következő testületeknek: External Advisory Committee of the EU on Global Change, Scientific Committee of the Stockholm World Water Conference, External Advisory Panel of Public Utility Board of Singapore, UN World Water Assessment Technical Advisory Committee, IWA Board of Directors, Editorial Board of Ecohydrology and Hydrobiology. Egyik kutatónk részt vesz a felszín alatti vizekkel foglalkozó EU-munkacsoport munkájában, a külső megbízással résztvevő munkatársunk pedig egyik vezetője volt az IPCC 4. jelentését elkészítő csoportnak, így ő is részese az alkotógárdát jutalmazó Nobel-békedíjnak.

Oktatási és kutatási kapcsolatok 14 külföldi egyetemmel (Bécs, Graz, Karlsruhe, München, Zürich, Varsó, Prága, Lyngby, Trondheim, Cornell, Brüsszel, Gent, Massachusetts, Florida) és a IIASA-val létesültek. A hazai kapcsolatok túlnyomóan a projektek végrehajtásához kötődnek. Szoros együttműködés alakult ki az MTA kutatóhelyeivel (TAKI, Földrajztudományi Kutatóintézet, BLKI, Duna Kutató Állomás), a Corvinus, a Debreceni, a Szegei, a Szent István és a Veszprémi Egyetemmel, az Országos Meteorológiai Szolgálattal, a VITUKI-val, Környezetvédelmi és Vízügyi Igazgatóságokkal, Nemzeti Park Igazgatóságokkal.

A különböző szakmai fórumokon 2007-ben a kutatócsoport vezetője, tagjai és a támogató tagok 17 tudományos (ebből 11 külföldön) és 21 ismeretterjesztő előadást tartottak.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

2007-ben, a kérdéses területen a Tanszék és a Kutatócsoport egy FP6-os, egy EU-támogatású hazai, egy INTERREG, két NKFP, egy OTKA és egy GVOP pályázaton projekt kidolgozásában vett részt. A csoport önálló témával nem rendelkezett. A pályázatok összesen 2007-re jutó költségkerete alvállalkozók nélkül 74 millió Ft volt. Részletek a pályázatokat bemutató mellékletben találhatók.

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

1. Honti M, Istvánovics V, Osztóics A: Stability and change of phytoplankton communities in a highly dynamic environment – the case of large, shallow Lake Balaton (Hungary). *Hydrobiologia*, 581: 225–240 (2007)
2. Istvánovics V, Clement A, Somlyódy L, Specziár A, Tóth L G, Padisák J: Updating water quality targets for shallow Lake Balaton (Hungary), recovering from eutrophication. *Hydrobiologia*, 581: 305–318 (2007)
3. Honti M: Stochastic parallel processing can shape photosynthesis-irradiance curves in phytoplankton – the Q model. *Hydrobiologia*, 592: 315–328 (2007)
4. Budai P, Clement A: Estimation of nutrient load from urban diffuse sources: experiments with runoff sampling at pilot catchments of Lake Balaton in Hungary. *Water Science and Technology*, 65 (1): 295–302 (2007)
5. Koncsos L, Balogh E: Elárasztási modellel támogatott árvízi kárszámítás a Tisza völgyében. *Hidrológiai Közlöny*, 2007/5: 23–28 (2007)
6. Koncsos L, Kozma ZsA: hullámtéri feliszapolódás becslése a Tisza magyarországi szakaszán. *Hidrológiai közlöny*, 2007/5: 59–63 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	5,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,5
PhD, kandidátus: 0	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			0
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			6
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		4
nemzetközi együttműködés keretében: 0	SCI által regisztrált folyóiratban:		3
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 4	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		49
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			41
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> : 0	könyvfejezet: 1	jegyzet: 0	
<i>Idegen</i> nyelven könyv: 0	könyvfejezet: 3	jegyzet: 0	
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 13	posztterek száma:		0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 1	Doktori iskolát vezetőik száma:		1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> : 4	Gyakorlati kurzusok száma:		1
TDK munkát készítő hallgatók száma: 0	Diplomamunkát: 1	PhD-t:	2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			130
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			27 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> : 0	Teljes saját bevétel:		0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			6,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			2
NKFP: 2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		38,9 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> : 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		2,2 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			3
EU forrásból: 3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		26,8 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## DE HOMOGEN KATALÍZIS KUTATÓCSOPORT

Vezető: Joó Ferenc, az MTA rendes tagja  
4010 Debrecen, Pf. 7  
Telefon: (52) 512-900, Fax: (52) 512-915  
e-mail: fjoo@delfin.unideb.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

- Vízoldható átmenetifém – N-heterociklusos karbén-komplexek szintézisének és katalitikus sajátságainak vizsgálata.
- Szén-dioxid és karbonátok vizes közegű hidrogénezésének kísérletes és kvantumkémiai vizsgálata.
- Rögzített (heterogenizált) komplex katalizátorok vizsgálata
- Biológiai membránok módosítása katalitikus hidrogénezéssel

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

Kutatási eredményeiket nemzetközi folyóiratokban *hat* megjelentközleményben ismertették, melyek összeített hatástényezője (IF-2006) 12,746.

Az N-heterociklusos karbén komplexek valamint az arén-foszfin típusú oldható katalizátorok esetében ebben az évben elsősorban a fotokémiai reakciók vizsgálatát végezték, de emellett folytatták a korábban szintetizált  $[\text{RuClCp}(\text{mPTA})_2](\text{CF}_3\text{SO}_3)_2$  és  $[\text{RuClCp}(\text{HdmPTA})]$  vízoldható komplexek katalitikus aktivitásának felderítését is (mPTA = N-metil-1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán, HdmPTA = protonált N,N'-dimetil-1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán).

A fotokémiai vizsgálatokban teszt-reakcióként a benzofenon katalitikus reakcióját vizsgálták 2-propanolról történő hidrogén-átvitellel. Katalizátorként  $[\text{Ru}(2,2'\text{-bipy})(\text{bmim})(\text{p-cimol})]$  (bipy = 2,2'-bipiridil, bmim = 1-butyl-3-metil-imidazolilidén, p-cimol = p-izopropil-toluol) vegyes ligandumú Ru(II)-N-heterociklikus karbén-komplex, továbbá a a monoszulfonált trifenilfoszfint (mtpms) tartalmazó  $[\text{RhCl}(\text{mtpms})_3]$  komplex szolgált. Utóbbi katalizátorral végzett mérések nagyobb részében  $[\text{Ru}(\text{bipy})_3]\text{Cl}_2$  komplexet alkalmaztak fotoszenzibilizátorként. Megállapították, hogy mind a  $[\text{Ru}(2,2'\text{-bipy})(\text{bmim})(\text{p-cimol})]$  mind a  $[\text{RhCl}(\text{mtpms})_3]$  katalizálja a hidrogén-átvitelt. E jelenség további vizsgálatokat igényel, melyek révén nemcsak aktív de stabilis, fotokémiailag stimulálható katalizátor rendszerek kifejlesztése remélhető.

Az új, vízoldható  $[\text{RuClCp}(\text{mPTA})_2](\text{CF}_3\text{SO}_3)_2$  és  $[\text{RuClCp}(\text{HdmPTA})]$  komplexeket okt-1-en-3-ol redox izomerizációjának katalízisében vizsgálták. (Az allil-alkoholok redox izomerizációja a karbonilvegyületek előállításának maximális atomhatékonyságú, környezetbarát módja.) Mindkét komplex aktívnek bizonyult ebben a reakcióban. Meghatározták a  $[\text{RuClCp}(\text{mPTA})_2](\text{CF}_3\text{SO}_3)_2$  által katalizált reakció sebességének pH-függését, és részletes kinetikai vizsgálatokat végeztek a  $[\text{RuClCp}(\text{HdmPTA})]$  komplexszel is (a reakció időbeli előrehaladása, a sebesség pH- és hőmérséklet-függése). Elvégezték mindkét komplex vizes közegű egyensúlyainak pH-potenciometriás vizsgálatát. Megállapították, hogy

a kiindulási [RuClCp(HdmPTA)] komplex pH = 9,8 oldatokban protont veszít; ez a lehetőség a preparatív tapasztalatokból már ismert volt, de kvantitatív meghatározására most került sor.

Megállapították, hogy a környezetben könnyen hozzáférhető karbonátok (pl. CaCO<sub>3</sub>) vizes szuszpenzióban CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> nyomás alatt oldható formiátoikká hidrogénezhető vízóldható katalizátorok használatával (pl. [{RuCl<sub>2</sub>(mtpms)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>). Molekuláris hidrogén helyett a viszonylag olcsó Na-hipofoszfít ill. az ipari melléktermék poli(metilhidrosziloxán) is használható redukálószerként. A CaCO<sub>3</sub> hidrogénezés érdekességét az adja, hogy a kalciummal egyenértékű mennyiségben felül szabad hangyasav is képződik, ami más bázisok alkalmazásakor nem történik meg.

Nemzetközi együttműködésben kvantumkémiai módszerekkel megállapították az etén és CO<sub>2</sub> (ill. karbonsavak) kapcsolásának lehetséges mechanizmusát.

Szulfonált trifenilfoszfint (mtpms) tartalmazó Ru(II)- és Rh(I)-komplexeket rögzítettek ioncserélőkön és ezeket a heterogenizált komplexeket alkalmazták diszubsztituált acetilének (pl. difenilacetilén) sztereoszelektív hidrogénezésére vizes-szerves kétfázisú rendszerekben. A reakció mechanizmusát –ezen belül a víz szerepét – kvantumkémiai számításokkal állapították meg.

N-Heterociklusos karbén ligandumot tartalmazó Ru(II)-komplexeket rögzítettek szilika és alumina hordozók felületére heteropolisavak alkalmazásával. Az így nyert heterogenizált komplex katalizátorokat olefinek, aldehidek és ketonok hidrogénezésére alkalmazták mind etanolos, mind vizes szuszpenzióban. Kimutatták, hogy a rögzítés nem befolyásolja a katalizátorok működési mechanizmusát, azaz a hidrogénezések olyan módon játszódnak le, mint homogén oldatokban.

Biológiai membránok modelljéül szolgáló foszfolipid liposzómák hidrogénezését és deuterálását valósították meg Pd-alapú oldható katalizátorral. A deutérium-beépülés mechanizmusát NMR-módszerekkel vizsgálták.

Az eredmények összesen három PhD értekezés részét képezik, melyek megvédésére 2008 során kerül sor. A rögzített komplex katalizátorok felhasználására –további kutatások eredményeképpen- a Thales Nanotechnology Rt. által kifejlesztett H-Cube hidrogénező készülékben kerülhet sor.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A biológiai membránok vizsgálatát az MTA SZBK Biokémiai Intézete munkatársaival, a rögzített fémkomplexek katalitikus tulajdonságainak kutatását részben a Thales Nanotechnology Rt. részben pedig a Szegedi Tudományegyetem munkatársaival, a kvantumkémiai számításokat pedig az MTA Kémiai Kutatóközpont kutatóival együttműködésben végezték.

A D29 és D30 COST Akció továbbá egy FP6 MRTN pályázat (AQUACHEM) keretében 11 ország 16 laboratóriumával állnak kutatási kapcsolatban.

MTA-CSIC támogatással a Zaragozai Egyetem (Spanyolország), TÉT pályázat keretében pedig az Almeríai Egyetem (Spanyolország) munkatársaival végeztek közös kutatásokat.



A hazai és nemzetközi együttműködésekben *négy* közlemény született az V. részben felsorolt *hat* publikáció közül.

A Kutatócsoport munkatársai 2007-ben is részt vettek a Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék oktatómunkájában, laboratóriumi gyakorlatok vezetésével (átlagosan 4 óra/fő/hét).

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A kutatások dologi kiadásait döntő részben a K 68482 ny.sz. NKTH-OTKA és az MRTN-CT-2003-503864 sz. („AQUACHEM” Marie Curie Research Training Network) EU FP6 pályázatok fedezték. Rövid idejű kutatócserék finanszírozásával jelentősen segítette a nemzetközi együttműködések az MTA-CSIC (Debrecen – Zaragoza) támogatás és a TÉT E-10/2005 pályázat (Debrecen – Almería) valamint a COST D29 és D30 Akció is.

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

1. Horváth HH, Papp G, Csajági C, Joó F: Selective catalytic hydrogenations in a microfluidics-based high throughput flow reactor on ion-exchange supported transition metal complexes. A modular approach to the heterogenization of soluble complex catalysts. *Catalysis Communications*, 8, 442–446 (2007)
2. Zsigmond Á, Undrala S, Notheisz F, Papp G, Joó F: New application of an anchored Ru(II)-N-heterocyclic carbene complex. *Catalysis Letters*, 115, 163–168 (2007)
3. Kovács G, Ujaque G, Lledós A, Joó F: The Role of Water in the Stereoselective Hydrogenation of 1,2-Diphenylacetylene Catalyzed by the Water-Soluble  $[{\text{RuCl}_2(\text{mtppps})_2}]_2$ . *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2879–2889 (2007)
4. Fekete M, Joó F: Transfer Hydrogenation of Carbonyl Compounds and Alkenes Catalyzed by Ruthenium(II)-N-Heterocycle Carbene Complexes. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications* 72, 1037–1045 (2007)
5. Józai I, Joó F: Hydrogenation of Calcium Carbonate in Aqueous Systems Catalyzed by Rh(I)- and Ru(II)-Complexes using Poly(methylhydrosiloxane) or Hypophosphite as Hydrogen Sources. *Reaction Kinetics and Catalysis Letters*, 91, 361–368 (2007)
6. Aresta M, Pastore C, Giannoccaro C, Kovács P, Dibenedetto G, Pápai, I: Evidence for spontaneous release of acrylates from a transition-metal complex upon coupling ethene or propene with carboxylic moiety or CO<sub>2</sub>. *Chemistry - A European Journal*, 13, 9028–9034 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: DE Homogén Katalízis Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	4	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			7
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			6
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	6
nemzetközi együttműködés keretében:	4	SCI által regisztrált folyóiratban:	6
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	12,746	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	2250
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2010
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	4	posztterek száma:	9
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	0	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	1	Gyakorlati kurzusok száma:	5
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	1
		PhD-t:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			392
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			15 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	31,2 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,4 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	27,5 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## DE SZÁMELMÉLETI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Györy Kálmán, az MTA rendes tagja  
4010 Debrecen, Pf. 12.

Tel: (52) 512-900/22751, Fax: (52) 416-857  
e-mail: gyory@math.klte.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Debreceni Egyetemen egy nagyobb létszámú számelméleti kutatócsoport működik, melynek tagjai közül hat fő volt TKI állományú, rész munkaidőben foglalkoztatott kutató, további egy fő pedig a TKI-val munkavégzésre irányuló egyéb jogviszonyban álló kutató. Az alábbi beszámoló csupán az akadémiai támogatásban részesült kutatók, és a Debreceni Egyetem alkalmazásában álló kutatócsoport-vezető tevékenységére vonatkozik.

A kutatócsoport kutatási témája: „Diofantikus számelmélet és alkalmazásai”. Kutatásait elsősorban a következő területek vizsgálatára koncentrálták: ismeretlen fokszámú binom Thue egyenletek megoldására szolgáló hatékony algoritmusok kidolgozása, alkalmazások szuperelliptikus egyenletekre, általánosított Fermat-típusú egyenletek és alkalmazásaik számtani sorozatokban található teljes hatványokra, adott diszkriminánsú binér formákkal és adott rezultánsú binér forma párokkal kapcsolatos kvantitatív kutatások, általánosított Bernoulli polinomok gyökeivel kapcsolatos eredmények, S-egységek aritmetikai tulajdonságainak vizsgálata, diszkrét tomográfiai vizsgálatok, valamint szomszédsági szekvenciák elemzése.

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

A kutatócsoport tagjai valamennyi vizsgált területen fontos új eredményeket értek el. Kiemelkedőbb eredményeik a következők: A diofantikus számelméletben középponti szerepet játszanak a diszkriminánsokkal és rezultánsokkal kapcsolatos kutatások. A kutatócsoport tagjai külföldi társszerzőikkel közösen a korábbi eredményeket jelentősen általánosítva korlátot adtak adott rezultánsú binér forma párok ekvivalencia osztályainak számára. Megmutatták, hogy az általuk nyert korlát bizonyos paraméterek vonatkozásában közel optimális.

Azt követően, hogy Wiles a Fermat-sejtést igazolta, számos szerző, közöttük a kutatócsoport tagjai jelentős eredményeket nyertek a (\*)  $Ax^n + By^n = z^n$  alakú diofantikus egyenletekre vonatkozóan, ahol A,B bizonyos rögzített egészek, x, y, z,  $n > 2$  pedig ismeretlen egészek. A kutatócsoport tagjai a (\*)-ra vonatkozó eredményeiket felhasználva, valamint korábban kidolgozott módszereket alkalmazva, javítva és alkotó módon kombinálva x,y és  $n > 2$  ismeretlenekben teljesen megoldották az  $Ax^n - By^n = 1$  egyenletet minden olyan rögzített A,B egészre, melyek abszolút értéke legfeljebb 20. Bizonyításaikban a diofantikus számelmélet szinte valamennyi modern, mély módszerét felhasználták, esetenként alkotó módon továbbfejlesztették és kombinálták hatékony számítógépes eljárásokkal.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport kutatóhelyi támogatásban részesült tagjai szoros együttműködésben dolgoznak egymással, valamint más debreceni és budapesti számelméletes kollégákkal.

Kiterjedt nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Közös kutatásokat folytatnak holland, francia, angol, kanadai, amerikai, német, osztrák és kínai matematikusokkal.

Győry Kálmán, a kutatócsoport vezetője, meghívás alapján előadásokat tartott nemzetközi konferenciákon Moszkvában, Oberwolfachban, Ostravában és Smolenicében. Közös kutatásokat végzett Jan-Hendrik Evertsevel, a Leideni Egyetem egyik kiemelkedő matematikusával. Pethő Attila előadást tartott Grazban, részt vett a European Computer Science Summit konferencián Berlinben és a Varsóban tartott ISSE/SECURE 2007 konferencián. Az osztrák-magyar OMA projekt keretében Paul Surer és Benoit Loricant leobeni kutatók látogattak Debrecenbe és Folláth János és Huszti Andrea voltak Leobenben. A közös kutatások eredményeiként publikációk készültek, melyek megjelenés alatt, illetve előkészületben vannak. Hajdu Lajos közös kutatásokat végzett Robert Tijdemannel, tudományos előadásokat tartott Leidenben, Edinburghban és Smolenicében. Bérczes Attila a Magyar Állami Eötvös Ösztöndíj keretében 4 hónapot töltött a Leideni Egyetemen, ahol Jan-Hendrik Evertsevel végzett közös kutatásokat. Továbbá tudományos előadásokat tartott Leidenben, Edinburghban, Smolenicében és Utrechtben. Nyul Gábor előadást tartott Smolenicében és Egerben, 2007 novemberében kitüntetéses doktori címet szerzett.

A kutatócsoport tagjai a Debreceni Egyetem főállású oktatói, tevékenyen részt vesznek az egyetemi oktató és egyéb munkában.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A kutatócsoport tagjai témavezetőként, illetve közreműködőként számos hazai és nemzetközi pályázat (OTKA, TÉT) résztvevői.

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

1. Bérczes A, Evertse JH, Győry K: Diophantine problems related to discriminants and resultants of binary forms. In: Diophantine geometry (Ed.), pp 45–63 (2007)
2. Bérczes A, Evertse JH, Győry K: On the number of pairs of binary forms with given degree and given resultant., Acta Arithmetica 128: 19–54 (2007)
3. Győry K, Pintér Á: On the resolution of equations  $Ax^{\sp n}-By^{\sp n}=C$  in integers  $x,y$  and  $n \geq 3$ . I., Publicationes Mathematicae – Debrecen 70: 483–501 (2007)
4. Pintér Á, Rakaczki Cs: On the zeros of shifted Bernoulli polynomials., Applied Mathematics And Computation 187: 379–383 (2007)
5. Hajdu A, Hajdu L, Tijdeman R: General neighborhood sequences in  $\mathbb{Z}^{\sp n}$ ., Discrete Applied Mathematics 155: 2507–2522 (2007)
6. Hajdu L, Tijdeman R: Algebraic Discrete Tomography In: Advances in Discrete Tomography and Its Applications (Ed. ), Birkhäuser, pp 55–81 (2007)
7. Hajdu L: Arithmetic progressions in linear combinations of S-units, Periodica Mathematica Hungarica, 175–181 (2007)
8. Hajdu G, Hajdu L: Hosszú's equation over the Gaussian- and Eisenstein-integers, Aequationes Math. 20: 1–10 (2007)
9. Fazekas A, Hajdu A, Hajdu L: Properties of natural ordering relation for octogonal neighborhood sequences In: 5th International Symposium on Image and Signal Processing and Analysis (ISPA 2007) (Ed.), pp 168–173 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: DE Számelméleti Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	3	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			9
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			9
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	4
nemzetközi együttműködés keretében:	5	SCI által regisztrált folyóiratban:	4
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	2,017	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	64
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			64
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	3
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	15	posztterek száma:	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	2	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	5	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	10
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	2
			52
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			14 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	9,9 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			3
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5,4 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## DE SZÉNHIDRÁT-KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Antus Sándor, az MTA levelező tagja  
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.  
Telefon: (52) 512-900/22471, Fax: (52) 453-436  
E-mail: antuss@tigris.unideb.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Debreceni Egyetem-MTA Szénhidrátkémiai Kutatócsoport főleg alap kutatásokkal foglalkozik, amelynek során kémiai és jelentős hányaddal biokémiai, gyógyszerkémiái és immunológiai törvényszerűségek felismerésére is törekszik. Természetesen figyelemmel kíséri a természetes szerves vegyületek szintézismódszereit és szerkezetük vizsgálatát. A kutatócsoport egyik fontos kutatási területe a biológiai szabályozási és felismerési folyamatokban fontos szerepet játszó, negatív töltésű szénhidrátok szulfonsav mimetikumainak előállítása. A kutatócsoport másik célkitűzése a biológiailag aktív természetes anyagok, főleg az O-heterociklusok izolálása, szerkezet felderítése és szintézise, ez utóbbi munka során gyógyszerek fejlesztését elősegítő hatás-szerkezet összefüggések felismerése.

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

A munkatervükben megadottak szerint a tárgyévben is folytatták a biológiailag aktív szénhidrátok és természetes eredetű O-heterociklusos vegyületek kémiája területén végzett kutatásaikat. A munkát széles körű hazai és nemzetközi együttműködés keretében végezték. Legfontosabb eredményeik az alábbiak:

A gyógyászatban májvédő hatása révén forgalomban lévő természetes eredetű flavanolignán [(+)-silybin] részlegesen deuterált származékainak kémiai ionizációs TOF-MS spektroszkópiái viselkedését tanulmányozták. Eredményeik ilyen típusú növényi anyagok egyszerű és gyors azonosítását és szerkezetfelderítését teszik lehetővé (ld 1.sz. közlemény).

Természetes eredetű 1,4-benzodioxán vázas természetes anyagok szintézise kapcsán számos Troglitazon (II-típusú diabetes mellitus gyógyítására használt készítmény) analogont állítottak elő többlépcsős szintézissel. Tanulmányozták e vegyületek glikogén foszforiláz enzim gátló hatását, és alapvető hatás-szerkezet összefüggéseket állapítottak meg (ld 2.sz. közlemény).

Enantioszelektív szintézist dolgoztak ki potenciálisan farmakológiailag aktív 3-metil-izokromán származékok előállítására. Az így nyert vegyületek kiroptikai sajátságainak beható tanulmányozása alapján e kromofor rendszerre egyszerű kiroptikai szabályt adtak meg. Ez lehetővé teszi ilyen típusú természetes anyagok abszolút konfigurációjának egyértelmű hozzárendelését (ld 3.sz. közlemény).

A *Candida albicans* ellen hatásos O- és C-prenilezett flavanon származékok új szintézisét dolgozták ki és különféle *Candida*-fajokon végzett tesztek alapján hatás-szerkezeti összefüggéseket állapítottak meg (ld 4.sz. közlemény).

Részletesen tanulmányozták a szilárd fázisban mért cirkuláris dikroizmus (CD), a röntgenszínkép adatai alapján kvantum kémiai számítással (TDDFT) kapott CD alkalmazásának lehetőségét a konformative rögzített és flexibilis biológiailag aktív természetes eredetű O-heterociklusok abszolút konfigurációjának meghatározására. Kimutatták, hogy ez az új módszer a flexibilis molekulák esetén is nagy biztonsággal használható. Megjegyzendő az utóbbi esetekben az oldatfázisú CD mérés nem alkalmazható (ld 5.–9.sz. közlemények).

Influenza ellenes vegyületek kutatása során elsőként valósították meg az N-acetil-neuraminsav szulfonsav analogonjainak szintézisét. A származékok neuraminidázgátló hatását *Clostridium perfringens* és *Vibrio cholerae* eredetű neuraminidázokon tesztelték. A legjobb hatású vegyület 4,5 mmol koncentrációban fejtett ki 50%-os gátló hatást (ld. 10. közlemény).

Uloszonsavak szulfonsav-analógjainak szintézise során megfigyelték, hogy az anomer konfiguráció meghatározására gyakran alkalmatlan az irodalomban általánosan használt  $^3J_{C1,H3}$  három kötésen át ható csatolási állandó mérésén alapuló NMR módszer. Szisztematikus szintetikus és NMR vizsgálatokkal megállapították, hogy a szubsztituensek hatására a torziós szög alapján várható csatolási állandó érték esetenként jelentősen módosul, ezért a módszer csak korlátozottan alkalmas ketozil-glikozidok térszerkezetének igazolására (lásd 11.sz. közlemény).

A Kutatócsoport munkájának elismerését fémjelzi, hogy a 2007 őszén megjelent 4 kötetes Kompendium a „Protecting group manipulations in carbohydrate synthesis” című 55 oldalas fejezetének megírására a csoport munkatársait kérték fel (lásd 12.sz. közlemény).

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport eredményesen együttműködött az alábbi intézetekkel: Department of Chemistry, University of Paderborn (Prof. Dr. K. Krohn); Institut für Mikrobiologie, TU Braunschweig (Dr. B. Schulz, Dr. S. Draeger); Dipartimento di Chimica Industriale, Università di Pisa (Dr. G. Pescitelli, Prof. Dr. P. Salvadori); Department of Chemistry, Columbia University (Prof. Dr. N. Berova); DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék (Dr. Kövér Katalin); DE Orvosi Vegytani Intézet (Prof. Dr. Gergely Pál); DE Mikrobiológiai és Biotechnológiai Tanszék (Dr. Lenkey Béla); DE Alkalmazott Kémiai Tanszék (Prof. Dr. Zsuga Miklós); DE Fizikai Kémiai Tanszék Röntgendiffrakciós Laboratóriuma (Dr. Bényei Attila); DE Biokémiai Tanszék (Dr. Kandra Lili, Dr. Gyémánt Gyöngyi).

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport az elmúlt évben jelentős támogatást kapott az OTKA-tól: T 049436 4.455 E Ft, melyből készletbeszerzés 3.290 E Ft; NI 61336 22.100 E Ft, melyből készletbeszerzés 1.441 E Ft; K 62802 4.000 E Ft, melyből készletbeszerzés 1.540 E Ft; NK 48798 8.000 E Ft, melyből készletbeszerzés 3.100 E Ft

Immunológiai szempontból az N-acetil-neuraminsav származékok szintetikus hozzáférhetőségének kidolgozása nagy gyógyszerkémiai jelentőséggel bír. A neuraminsav karboxilcsoportjának metánszulfonsavval történő helyettesítésével nyert vegyület biológiai hatása igen kedvező és a részletes farmakológiai vizsgálatok folyamatban vannak. Jelentős eredmények születtek a véralvadás gátló szénhidrátszármazékok kutatása területén is. Számos heparin típusú oligoszacharid szintézisét oldották meg és sikeres erőfeszítéseket tettek cukorkénsav észtereknek és izoszterjeinek előállítására is. A cukorbetegség (diabetes mellitus) kezelésére potenciálisan alkalmas O-heterociklusok egyszerű előállítását oldották meg, valamint számos antibakteriális hatású természetes anyag izolálását és szerkezetfelderítését végezték el. Az antibakteriális hatású O-heterociklusok kutatása területén külön is kiemelő, hogy a nőgyógyászati területen komoly egészségkárosodást okozó gombák (*Candida*-fajok) ellen hatásos prenilzett flavanonok előállítása és hatás-szerkezet összefüggések felderítése új utakat nyitott meg ilyen típusú nem toxikus készítmények kifejlesztéséhez.

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

1. Kéki S, Tóth K, Zsuga M, Ferenczi R, Antus S: (+)-Silybin, a Pharmacologically Active Constituent of *Silybum Marianum*: Fragmentation Studies by Atmospheric Pressure Chemical Ionization Quadrupole Time-of-flight Tandem Mass Spectrometry. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 21, 2255–2262 (2007) IF: 2.680
2. Juhász L, Docsa T, Brunyászi A, Gergely P, Antus S: Synthesis and Glycogen Phosphorylase Inhibitor Activity of 2,3-Dihydrobenzo[1,4]dioxin Derivatives. *Bioorg. Med. Chem.* 15, 4048–4056 (2007) IF: 2.624
3. Kerti G, Kurtán T, Illyés T-Z, Kövér KE, Sólyom S, Pescitelli G, Fujioka N, Berova N, Antus S: Enantioselective Synthesis of 3-Methylisochromans and Determination of Their Absolute Configurations by Circular Dichroism. *Eur. J. Org. Chem.* (2007) 296–305 IF: 2.769
4. Kenéz Á, Juhász L, Lestár Zs, Lenkey B, Antus S: Természetes eredetű O- és C-prenilezett flavanonok szintézise és antifungális aktivitásuk vizsgálata. *Acta Pharm. Hung.* 77(1), 17–22 (2007) IF: –
5. Hussain H, Krohn K, Flörke U, Schulz B, Dräeger S, Pescitelli G, Antus S, Kurtán T: Absolute Configuration of Glotoxanthone A and Secondary Metabolites from *Microdiplodia* sp. A Novel Solide-state CD/TDDFT Approach. *Eur. J. Org. Chem.* 2007, 292–295 IF: 2.769
6. Krohn K, Knock I, Elsässer B, Flörke U, Schulz B, Dräeger S, Pescitelli G, Antus S, Kurtán T: New Natural Products Isolated from the Endophytic Fungus *Ascochyta* sp. from *Melilotus dentatus*. *Eur. J. Org. Chem.* 2007, 1123–1129 IF: 2.769
7. Krohn K, Ullak Z, Hussain H, Flörke U, Schulz B, Draeger S, Pescitelli G, Salvadori P, Antus S, Kurtán T: Massarilactones E-G, New Metabolites from the Endophytic Fungus *Coniothyrium* sp., Associated with the Plant *Artemisia maritima*. *Chirality*, 19, 464–470 (2007). IF: 2.165
8. Krohn k, Farooq U, Flörke U, Schulz B, Draeger S, Pescitelli G, Salvadori P, Antus S, Kurtán T: Secondary Metabolites Isolated from an Endophytic *Phoma* sp. – Absolute Configuration of Tetrahydropyrenophorol Using the Solid-State TDDFT CD Methodology. *Eur. J. Org. Chem.* (2007) 3206–3211. IF: 2.769
9. Dai J, Krohn K, Elsässer B, Flörke U, Dräeger S, Schulz B, Pescitelli G, Salvadori P, Antus S, Kurtán T: Metabolic Products of the Endophytic Fungus *Microsphaeropsis* sp. from *Larix decidua*. *Eur. J. Org. Chem.* (2007) 4845–4854. IF: 2.769
10. Szabó ZB, Borbás A, Bajza I, Lipták A, Antus S: A First Synthesis of Sulfonic Acid Analogues of N-Acetylneuraminic Acid. *Tetrahedron Lett.* 49, 1196–1198 (2008) IF: 2.509
11. Májer G, Borbás A, Illyés TZ, Szilágyi L, Bényei ACs, Lipták A: Synthesis of ketopyranosyl glycosides and determination of their anomeric configuration on the basis of the three-bond carbon-proton couplings, *Carbohydr. Res.* 342, 1393–1404 (2007). IF: 1.703
12. Bajza I, Borbás A, Lipták A: Protecting group manipulations in carbohydrate synthesis in *Comprehensive Glycoscience I-IV*, edited by J.P. Kamerling, Elsevier Science, 2007, Volume I. pp 203–259.



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6,7	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,7
PhD, kandidátus: 3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			20
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			20
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		9
nemzetközi együttműködés keretében: 11	SCI által regisztrált folyóiratban:		9
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 23,017	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		102
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			89
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> : 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	
<i>Idegen</i> nyelven könyv: 0	könyvfejezet: 1	jegyzet: 0	
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0			<i>ebből</i> külföldön: 0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 4			posztterek száma: 4
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 2		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 2	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 3		Doktori iskolát vezetőik száma: 0	
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> : 4		Gyakorlati kurzusok száma: 15	
TDK munkát készítő hallgatók száma: 0		Diplomamunkát: 1	PhD-t: 7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			63
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			27 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> : 1		Teljes saját bevétel: 41 MFt	
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			38 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> : 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		2,6 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## **ELTE EGERVÁRY JENŐ KOMBINATORIKUS OPTIMALIZÁLÁSI KUTATÓCSOPORT**

Vezető: Frank András, az MTA doktora  
ELTE TTK Operációkutatási Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C  
Telefon: 209-0555/8578, Fax: 381-2156  
e-mail: frank@cs.elte.hu

### **I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben**

Az Egerváry Kutatócsoport célja a kombinatorikus optimalizálás területén tovább erősíteni a magyar hagyományt a témával foglalkozó kutatók együttműködésének elősegítésével, valamint fiatal kutatóknak és egyetemistáknak a kutatásba és nemzetközi kapcsolatokba történő bevonásával.

A csoport fő kutatási feladata kombinatorikus optimalizálási problémák strukturális tulajdonságainak vizsgálata, és ennek segítségével hatékony algoritmusok létrehozása. A csoport által publikált ISSN 1577-4451 számú EGRES Technical Report sorozatban 2007-ban 11 új publikáció jelent meg e témákban.

A csoport fontos feladatának tekinti a felsőoktatási képzésben való részvételt, ennek fő megjelenése az ELTE TTK-n hetente megtartott Egerváry Szeminárium, illetve megemlítendő, hogy a csoport fiatal tagjai közül 2007-ben négyen sikerrel megvédték a doktori disszertációjukat, illetve hogy a szeminárium munkájába több új doktorandusz és egyetemi hallgató is aktívan bekapcsolódott.

A csoport aktívan részt vesz a kombinatorikus optimalizálás nemzetközi életében, ezen belül egy fontos feladata az Ötödik Magyar-Japán Diszkrét Matematikai Konferencián való részvétel volt, melynek a csoportvezető volt az egyik társszervezője. Emellett a kutatócsoport képviselte Magyarországot a 2007-ben lezárt ADONET Marie Curie Research Training Network projektben, ami egy 10 ország kutatóintézeteiből álló kutatási-képzési konzorcium. Az együttműködés keretében 2007-ben négy külföldi fiatal kutató vett részt a csoport munkájában.

A csoport tagjainak több éves nagyszabású vállalkozása a LEMON diszkrét programozási és modellezési programkönyvtár fejlesztése. Emellett csoport tagjai részt vesznek több nemzetközi együttműködésben, így telekommunikációs és közlekedési kutatási projekteken.

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

Az alábbiakban részletezzük a csoport munkájának eredményeit, kiemelve a csoport tagjai, és a velük együttműködő hazai és külföldi kutatópartnerek által a beszámolási évben elért eredményeit, melyek a kombinatorikus optimalizálás számos ágát is érintik. A következőkben kutatási témákra lebontva szerepelnek az eredmények.

Hálózatok összefüggősége: A csoport 4 tagja összesen 4 dolgozatot írt a hálózatok összefüggősége témájában. Ezen belül több témában is jelentős előrelépés történt: algoritmus született partíciókorlátos élösszefüggőség-növelésre; egy fontos eszközt dolgozott ki Euler-féle leemelések kezelésére, illetve szimmetrikus ferdén-szupermoduláris függvények fedésére.

Matroidok, merevség: A csoport 4 tagja 2 külföldi és 1 hazai kutatóval együttműködve összesen 6 dolgozatot írt a témában. Kiemelhető a csoport hong-kongi vendégével közös publikáció, melyben fokkorlátos szubmoduláris áramokra adnak konstans-additív-approximációs algoritmust, illetve két, a csoport brit vendégével közös dolgozat test-csuklórúd szerkezetek merevségéről és dekompozíciójáról. További dolgozatok születtek a lambda-supermoduláris függvények egy újszerű vizsgálatáról, illetve a műszaki egyetem professzorával közösen a tensegrity témakörében.

Faktorok, párosítások: A témában 4 dolgozat született a csoport 3 kutatójának munkája alapján. Két dolgozat a stabil szobatárs feladat egy általánosításával foglalkozik, egy továbbiban a Boros-Gurvich-tétel egy vonatkozását vizsgálják, végül a keresztező páratlan halmazrendszereket fedő párosítására adtak egy elégséges feltételt.

A routing problémák területén egy dolgozat született, melyben a forráskorlátos folyamatok kérdéseit tisztázza a szerző.

Együttműködünk a LEMON nyílt forráskódú diszkrét programozási programkönyvtár fejlesztésében, melynek célja a gráfelméleti, hálózat-optimalizálási algoritmusok számára alkalmas környezet megteremtése. A program jelenlegi változata és dokumentációja megtalálható a <http://lemon.cs.elte.hu/> címen.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

Az ELTE Operációkutatási Tanszékén kívül a kutatócsoport szoros kapcsolatokat ápol az ELTE Számítógéptudományi Tanszékével, és a BME Számítástudományi és Információelméleti Tanszékével, melyek kutatói rendszeresen részt vesznek a csoport szemináriumán.

Nemzetközi együttműködés keretében a kutatócsoport tagjaival közös kutatásokban részt vettek többek között brit, japán, hong-kongi matematikusok. Az európai ADONET projekt keretében fiatal kutatóként 3-5 hónapot töltött a kutatócsoportban négy külföldi doktorandusz, közülük hárman nyugat-európai intézetekből, egy pedig amerikai egyetemről. Szintén az ADONET keretében a csoport két fiatal kutatója 6, illetve 10 hónapot töltött a grenoblei kutatóintézetben, illetve hatan részt vettek az ADONET nyári iskoláján. Ketten a Georgia Tech-en és a Siemens müncheni kutatóintézetében voltak több hónapos tanulmányúton.

A csoport együttműködik a MIK Mobil Innovációs Központ kutatásaival, melyben az ELTE-n kívül a BME és több hazai cég vesz részt, és célja mobil informatikai és telekommunikációs hálózatokban felmerülő feladatok megoldása. A csoport több tagja részt vesz a LEMON kombinatorikus optimalizálási szoftver fejlesztésében. Egy korábbi kapcsolat folytatásaként a France Telecommal egy új kutatási együttműködés indult ebben az évben, melynek célja heterogén hálózatok optimalizálása.

A csoport tagjai az év során 16 előadást tartottak jelentősebb konferenciákon, köztük kiemelhető 5 előadás a Sendaiban megrendezett Ötödik Magyar-Japán Diszkrét Matematikai Konferencián, illetve 6 előadás a Magyar Operációkutatási Konferencián. Ezek mellett több európai, távolkeleti és amerikai konferencián, workshopon is szerepeltek a csoport tagjai.

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A csoport egy tagjának kutatói munkáját ebben az évben az Öveges Ösztöndíj finanszírozta. A csoport vezetője és több tagja részvételével meghosszabbította a France Telecom az együttműködését.

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

1. Pap Gy: Combinatorial algorithms for matchings, even factors and square-free 2-factors, *Mathematical Programming* 110(1): 57–69 (2007)
2. Makai M, Pap Gy, Szabó J: Matching problems in polymatroids without double circuits In: *Proceedings of IPCO2007, LNCS 4513 (Ed.)*, pp 167–181 (2007)
3. Jordán T, Jackson B: Rigid components in molecular graphs, *Algorithmica* 48(4): 399–412 (2007)
4. Frank A, Végh AL: Kombinatorikus algoritmus pontösszefüggőség eggyel való növelésére, *Matematikai Lapok* 13: 57–67 (2007)
5. Pap Gy: Packing non-returning A-paths, *Combinatorica* 27(2): 247–251 (2007)
6. Makai M: On maximum cost  $K_{\{t,t\}}$ -free  $t$ -matchings of bipartite graphs, *Siam Journal On Discrete Mathematics* 21(2): 349–360 (2007)
7. Frank A, Király Z, Kotnyek B: An algorithm for node-capacitated ring routing, *Operations Research Letters* 35(3): 385–391 (2007)
8. Jordán T, Iwata S: Orientations and detachments of graphs with prescribed degrees and connectivity In: *Proc. 5th Hungarian-Japanese symposium on discrete mathematics and its applications (Ed. ), Sendai*, pp 149–153 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	17	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	8	MTA doktora:	2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			12
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			27
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	7
nemzetközi együttműködés keretében:	0	SCI által regisztrált folyóiratban:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	5,001	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	27
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			21
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	4	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	8	posztterek száma:	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	0	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	0	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatók órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	7
			2
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			13 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	3	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8,6 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## ELTE ELMÉLETI FIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Horváth Zalán, az MTA rendes tagja  
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1.A  
Telefon: 372–2546, Fax: 372–2509  
e-mail: zalanh@ludens.elte.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A csoport kutatásai a korábbi hagyományokra támaszkodva a részecskefizika, valamint a statisztikus fizika területén folytak. A feladat egyrészt a megkezdett kutatási témák eredményes folytatása, másrészt pedig a kutatásba új területeknek a bevonása volt. Sajnos nem az összes témát tudtuk folytatni, tekintettel a csoport létszámának csökkenésére.

A kutatócsoport tagjai aktívan vesznek részt az egyetemi oktatásban, diplomamunkások és doktoranduszok vezetésében. Számos eredmény született az Elméleti Fizikai Tanszék oktatóival, valamint más intézmények kutatóival való együttműködés alapján. A csoport tagjai alapkutatással foglalkoznak, melyek társadalmi hasznossága a világ, ezen belül a fizikai rendszerek viselkedésének jobb megértése révén jelenik meg, gazdasági hasznossága részben csak közvetetten, részben pedig csak viszonylag hosszú idő múlva nyilvánul meg.

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

#### *Részecskefizikai kutatások*

A csoport tagjai vizsgálták az úgynevezett Casimir effektust. A Casimir effektus alatt a véges térfogatban definiált kvantumtérelmélet vákuum-energiájának térfogatától és peremfeltételektől való függését értjük. Egy univerzális formulát származtattak a párhuzamos lemezek közötti kvantum-térelmélet alapállapotú energiájának térfogat-függésére. Reprodukálták az irodalom összes (az adott geometriára érvényes) Casimir effektus eredményét, és azokat új peremfeltételeket leíró eredményekkel egészítették ki. A kvantumtérelmélet nemtriviális vákuum-várható értéke esetében is leírták a Casimir effektus nagy térfogatú viselkedését összekapcsolva azt a reflexiós mátrix szingularitásának szerkezetével.

Megadták integrálható térelméletekben a formfaktorok végesméret függését és segítségével egy szisztematikus kifejtést származtattak véges hőmérsékletű korrelációs függvényekre.

A bootstrap módszerrel megoldott kvantum-térelméletek csak úgy kapcsolhatók össze Lagrange függvénnyel definiált társaikkal, ha a modelleket véges térfogatban egzaktul megoldják. Erre két szokásos módszer az NLIE (Nem Lineáris Integrál Egyenlet) és a TBA (Termodinamikai Bethe Ansatz). A csoport tagjai az elmúlt évben az NLIE módszert kiterjesztették a sine-Gordon modell peremes gerjesztéseire. Sikerült az összes peremes kötött állapothoz olyan integrálegyenlet rendelni, mely az állapot viselkedését minden véges térfogat mellett egzaktul leírta. Ezt a nagy-térfogatú határesetben az állapot energiájával és reflexiós tulajdonságaival ellenőrizték. A TBA módszert a peremes sinh-Gordon modellben vizsgálták. Megmutatták, hogy a modell kis térfogatú viselkedését a peremes Liouville modell írja le, ennek reflexiós faktorait szintén ellenőrizték. Általánosították a TBA egyenleteket az ellentétes peremfeltételek leírására. Végül alátámasztották, mind analitikusan mind pedig numerikusan a Liouville és a sinh-Gordon elmélet paraméterei között korábban megsejtett kapcsolatot, származtatták a véges térfogati spektrumukat leíró TBA egyenleteket. A fúziós módszer alkalmazásával egzaktul megoldották az integrálható defekteket tartalmazó Lee-Yang és sinh-Gordon modelleket.

A 2008-ban nagy nemzetközi együttműködésben, magyar részvétellel indul az LHC, CERN, Genf. A kísérlet egyik fő feladata a részecskefizika rendkívül sikeres Standard Modellje legkevésbé ismert részének, a szimmetriasértő szektornak a kísérleti feltérképezése. A modell egyetlen kísérletileg még nem azonosított részecskéje a szimmetriasértésért felelős Higgs bozon, amely a modell elméleti problémáinak többségéért (pl. hierarchia probléma) is felelős. Ezért különösen fontos alternatív modelleket vizsgálni és azok kísérleti jóslatait összevetni az eddigi és a tervezett kísérletekkel. A csoport tagjai erősen kölcsönható fermionokra épülő dinamikai szimmetriasértő modellt javasoltak az elektrogyenge kölcsönhatások Standard Modelljének alternatívájaként. A modellben a Higgs részecskét és kölcsönhatásait kicserélték két új fermionra és azok effektív négy-fermion kölcsönhatásaira. Az új fermionok kondenzátuma sérti az elektrogyenge szimmetriát, tömeget generál a mértékbozonoknak és az új fermionoknak is. Meghatározták a javasolt modell szimmetriasértő alapállapotát leíró úgynevezett gap-egyenleteket, és ezek megoldásával megadták a kísérleti eredményeket helyesen leíró paraméter-tartományt, illetve a modell érvényességi határát.

### *Statisztikus fizikai kutatások*

A csoport tagjai vizsgálták a kicsapódási mintázatok külső terek segítségével történő kontrollját. A nemegyensúlyi struktúrák gyakran reakció-diffúziós frontok mögött jelennek meg. Emiatt a mintázatok tervezésének igen lényeges eleme a frontok mozgásának és tulajdonságainak kontrollja. A kontroll két ismert változata a reagensek kezdeti térbeli konfigurációjának megfelelő megválasztása és a reagensek koncentrációinak finomhangolása. Alkalmazás szempontjából azonban egyik módszer sem eléggé flexibilis a végső mintázat meghatározásában. E területen a fő eredmény az, hogy kidolgoztak egy a fent leírt módszereken túlmutató új koncepciójú kontroll mechanizmust. A szokásos reagensek mellett bevezettek egy extra diffúzív „reagens”-t (kontroll tér), amelynek feladata a pH vagy a hőmérséklet lokális megváltoztatása a koncentrációjának függvényében. E változtatásokon keresztül a releváns reakció végbemenetelének helyét és idejét, s azon keresztül a mintázatot lehet kontrollálni. Megmutatták, hogy a legegyszerűbb, az egyik határon át bediffundáló kontroll tér esetén is új struktúrák figyelhetők meg, mint például a még meg nem magyarázott inverz Liesegang mintázat.

Vizsgálták ezentúl az extrém statisztikákat korrelált rendszerekben. A korrelációk hatásának megértése az extrém érték statisztikák jelenleg leglényegesebb kérdése. Az  $1/r^\alpha$  típusú korrelációkra kapott, előző beszámolóknak ismertetett eredmények felvetették, hogy divergáló fluktuációk esetén a határfeltételek lényeges szerepet játszhatnak a kialakuló határeloszlásban. Valóban,  $\alpha > 1$ -re azt kapták, hogy a határeloszlás függ a jel két végén alkalmazott határfeltételtől. Mivel egy idősor esetén rendszerint a határfeltételek nem ismertek, ezért megvizsgálták a kísérleteknek leginkább megfelelő szituációt, amikor a kezdeti érték adja az egyik határfeltételt, s a maximumot a kezdeti értéktől mérik, a másik végen pedig különböző határfeltételeket alkalmazhatók (a szabad határfeltétel a legvalószerűbb). Eredményül az eloszlásfüggvények újabb képtárát kapták, amelyet fel lehet használni univerzalitási kérdések mélyebb analizésében.

A csoport egy tagja szilárdtestfizikusokkal való kollaborációban kutatásokat végzett a diszlokáció rendszerek statisztikus leírása területén. Kapcsolatot tártak fel a diszlokációk mintázatképződése s rendezetlen, üvegszerű viselkedése között nagyskálájú szimulációk segítségével. Fő eredményük, hogy a diszlokáció dinamika az üvegszerű rendszerekre jellemző „aging” jelenségét mutatja, azaz a korrelációs függvény és az effektív diffúziós együttható nem invariáns az időbeli eltolásra. Kétfajta diszlokáció-üveget találtak, amelyeket

különböző mintázat jellemez. Folyamatban levő kutatásaik egyik eredménye, hogy a sztatikus árnyékolási elmélet diszlokációeloszlását adó effektív szabadenergia az egyensúly körüli dinamika leírására is alkalmazható. Ez a jelenség ugyan termodinamikai rendszerekben ismert, ebben az esetben azonban az a különleges, hogy gyakorlatilag zérus fizikai hőmérsékletűnek tekinthető diszlokációrendszerre vonatkozik.

Frusztrált fizikai rendszerek elméleti vizsgálatát nagyon megnehezíti, hogy nincsen „a priori” információk az alacsony hőmérsékletű fázis szerkezetét illetően. Az ezen rendszerek prototípusának tekinthető Ising spinüveg esetében a probléma az ún. replika-térelméleti modell segítségével közelíthető meg. A spinüveg-fázis szerkezete ekkor a rendparaméter szimmetriájában tükröződik: a replikaszimmetrikus elmélet a kisenergiájú ún. dropletgerjesztésekkel leírható spinüveg viselkedéssel ekvivalens. Ezzel szemben a replikaszimmetria sérülése a Parisi-féle, meglehetősen komplex, átlagtérelméletnek felel meg. A csoport tagjai részletesen vizsgálták a dropletelméletnek – mint eredetileg a rácson értelmezett spinmodellnek – és a replika-térelméletnek az összeférhetőségét. Megmutatták, hogy a replikaszimmetria-sértő fázis mindenképpen fennáll még a felső kritikus dimenzió ( $d=6$ ) alatt is. Ugyanakkor egy teljesen új skálaelmélet segítségével a replikaszimmetrikus fázis alacsony dimenziókban (a fizikai dimenziókban:  $d=3,4$ ) való stabilizálódásának a lehetősége mellett érveltek.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

A csoport tagjai együttműködnek egy sor hazai kutatóhellyel (BME Fizikai Kémia Tsz., DE, KFKI MFA és RMKI). Az ELTE-n folyó oktatásban is mindenki részt vesz szemeszterenként egy tantárgy oktatásával, vagy pedig heti 3-4 óra gyakorlattartással.

A csoport tagjai széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Ezek közül kiemelendők azok, ahová a kutatók hosszabb tanulmányutakat tettek, illetve ahonnan kutatók érkeztek látogatóba: Berni és Genfi Egyetem, valamint a CERN Svájcban, az ICTP Olaszországban, Grenoble-i Egyetem, Paris-Sud Egyetem és CEA-Saclay Franciaországban.

### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A csoport egy tagja témavezetőként vesz részt OTKA, valamint egy EU Marie Curie posztdoktori pályázatban. Kutatási eredményeikről 2007-ben négy cikk jelent meg referált folyóiratban. Résztvevőként többnyire mindenki szerepel különböző OTKA pályázatokban.

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

1. Bajnok Z, Palla L, Takács G: Boundary one-point function, Casimir energy and boundary state formalism in  $D+1$  dimensional QFT, Nucl.Phys. B772: 290–322. (2007)
2. Cynolter G, Lendvai E: Gap Equations and Electroweak Symmetry Breaking. J.Phys. G34: 1711–1720 (2007)
3. Burkhardt TW, Györgyi G, Moloney N, Rácz Z: Extreme statistics for time series: Distribution of the maximum relative to the initial value, Phys.Rev.E76: 41119 (2007)
4. Bakó B, Groma I, Györgyi G, Zimányi G: Dislocation Glasses: Aging during Relaxation and Coarsening, Physical Review Letters 98: 075701 (2007)
5. Antal T, Bena I, Droz M, Martens K, Rácz Z: Guiding-fields for phase-separation: Controlling Liesegang patterns, Phys. Rev. E 76: 046203 (2007)



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6,5
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	1
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			21
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			10
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	10
nemzetközi együttműködés keretében:	4	SCI által regisztrált folyóiratban:	10
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	38,023	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	142
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			116
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	2	posztterek száma:	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	6	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	31	Gyakorlati kurzusok száma:	14
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	3
			978
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			37 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,5 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## ELTE FEHÉRJEMODELLEZŐ KUTATÓCSOPORT

Vezető: Perczel András, az MTA doktora  
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.  
Telefon: 209–0555, Fax: 372–2592  
e-mail: perczel@chem.elte.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Kísérleti és számítási módszerekkel vizsgálták a fehérjék alkotóelemeinek szerkezetét, dinamikáját, szerveződését, és fehérjeszerkezet-funkció összefüggéseket állapítottak meg. Új, potenciálisan biológiailag aktív kismolekulákat állítottak elő.

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

*A fehérjék építőelemeinek szerkezetvizsgálata* (Ld. <sup>1</sup>Résztevő kutatócsoporti tagok és általuk vezetett hallgatók, PhD-hallgatók száma/összes résztvevő kutató, kutatócsoporti részesedés; <sup>2</sup>Saját kutatólaboratórium)

Kvantumkémiailag kimutatták, hogy az amiloid plakkok építőeleme, a  $\beta$ -redőzött réteg, az összes lehetséges közül a legstabilabb elrendeződése a dimer és oligomer peptideknek vákuumban és vizes közegben egyaránt. (*Részvétel: 2/3 fő, 100%<sup>1,2</sup>*)

A fehérjék legegyszerűbb királis és akirális építőkövének, az acetyl-N-metil-glicinnek és az acetyl-N-metil-alaninnak a szerkezetvizsgálatát végezték el spektroszkópiailag (IR, VCD) különböző oldószerben, és mátrix-izolációs technikával, valamint kvantum kémiai számításokkal. Környezettől függően eltérő konformereket azonosítottak. (*Részvétel: 2/5 fő, 25%*)

A legegyszerűbb oligopeptidek, azaz a (Gly)<sub>10</sub> és az (Ala)<sub>10</sub> nyújtott - 3<sub>10</sub> hélix konformáció átalakulásának vizsgálatakor azt tapasztalták, hogy e molekulák feltekeredésének belső entrópiája erős aminosav-oldallánc függést mutat. (*Részvétel: 1/5 fő, 15%*)

*Potenciálisan biológiailag aktív molekulák szintézise és vizsgálata* (Ld. <sup>1</sup>Résztevő kutatócsoporti tagok és általuk vezetett hallgatók, PhD-hallgatók száma/összes résztvevő kutató, kutatócsoporti részesedés)

Biológiai szempontból érdeklődésre számot tartó új ferrocenil-szubsztituált tiazolonok, 1,3-tiazinonok, pirimidonok és imidazonok sorozatát állították elő acilferrocénből tioszemikarbazonok, ill S-metilszármazékaik és a dimetil acetilén-dikarboxilát (DMAD) reakcióival. (*Részvétel: 3/5 fő, 100%<sup>1</sup>*).

Ferrocént és aromás/heteroaromás gyűrűt tartalmazó vegyületeket állítottak elő, amelyekből új glikozid- és oligopeptid származékok készültek (*Részvétel: 1/6 fő, 20%*). Aminocsoporttal szubsztituált ferrocenil-fenil-propenonokból szteroidtartalmú származékokat állítottak elő (*Részvétel: 2/6 fő, 20%*). Az új vegyületek számos esetben figyelemreméltó tumorellenes hatást mutattak *in vitro* kísérletekben, humán leukémia (HL-60) sejtvonalon. A ferrocenil csoport beépítése kedvezően befolyásolta a biológiai aktivitást. Az új származékok protein inhibitorokként (pl. szerinproteáz, topoisoméráz, p21 ill. p53 proteinek) is ígéretesek, ebben rejlik gyakorlati hasznosíthatóságuk. További új, kedvező citosztatikus hatású vegyületek előállításával és a farmakológiai vizsgálatok kibővítésével gyógyászatilag hasznos vegyületek kifejlesztésére van remény.

Elvégezték a 2-amino-1-aminometil-oxanorbornén egy-, két- és háromgyűrűs telített és telítetlen 3-oxo-karbonsavakkal való reakciója eredményeként kapott 4, 5 és 6 gyűrűs heteropoliciklusos vegyületek szerkezetigazolását és a képződött disztereomerek azonosítását. (Részvétel: 2/6 fő, 25%). A 2-amino-1-aminometil-di-*exo*- és di-*endon*orbornán/ént, továbbá egy di-*exo*-oxanorbornén analógot, valamint a rokon *cisz*-ciklohexánt és *transz*-ciklohexánt *p*-klorbenzaldehyddel *N*-bróm-szukcinimid jelenlétében reagáltatva, a várt kondenzált pirimidinek mellett, diaziridinek képződtek (Részvétel: 2/5 fő, 30%).

A vegyületek szerkezetét és dinamikáját komplex nagyműszeres vizsgálatokkal (MS, IR, NMR spektroszkópia, röntgendiffrakció) vizsgálták. A molekuláknál észlelt reaktivitásbeli különbséget több esetben DFT számításokkal támasztották alá.

#### *A fehérjeszerkezet és a funkció összefüggései*

A kimotripszin enzim katalitikus triádjában résztvevő hisztidin konformációjának változását és ennek a  $pK_a$  értékére kifejtett hatását vizsgálták *ab initio* szintű számításokkal. Kimutatták, hogy a  $pK_a$  változása a folyamat során döntően a hisztidin geometriájától függ és ez szerepet játszik a katalitikus folyamatban. (Részvétel: 1/2 fő, 100% - Saját kutatólaboratórium)

Kvantummechanikai módszerrel vizsgálták a dUTPáz enzim foszfátészter-hidrolízisének mechanizmusát. A vizsgált rendszerben kimutatták egy trigonális bipiramisos intermedier létezését amely a mechanizmus asszociatív jellegére utal. (Részvétel: 3/3 fő, 100%) A Mason-Pfizer majom  $\beta$ -retrovírus dUTPáz enzimje nukleokapszid domént (NC) is tartalmazó fúziós fehérje. Több vizsgálati módszer együttesével bizonyították, hogy az NC domén megváltoztatja a dUTPáz trimerben a molekulák konformációját és kapcsolódásának topológiáját. A két domén fúziójának szerkezeti és genomi előnyei vannak. (Részvétel: 1/15 fő, 5%)

Az orsóhalban található gonadotropin-felszabadító hormon variáns (IGnRH-III) direkt daganatgátló hatását vizsgálták tumor sejtvonalakon. IGnRH-III peptid-dimerek előállításával sikerült kedvezőbb tulajdonságokat elérni. Szerkezet-hatás összefüggések megállapítása céljából a monomer és dimer peptidok térszerkezetét DMSO-s és vizes közegben jellemezték ECD, VCD, FT-IR és NMR spektroszkópiai módszerekkel. (Részvétel: 2/16 fő, 30%)

A humán GAT-1 neurotranszmitter, mely biztosítja a gamma-aminovajsav (GABA) alacsony koncentrációját a szinapszisban, ezért antiepileptikus drogok lehetséges célpontja. Elvégezték a GABA és tizenkét származéka multidimenziós konformációanalízisét. A kapott szerkezeteket és a GAT-1 homológia modelljét felhasználva meghatározták a lehetséges kötési módot. Az eredmények hozzásegítenek gyógyszerjelölt molekulák célzott tervezéséhez. (Részvétel: 2/7 fő, 20%)

Az acilpeptid hidroláz (APH) neuropeptidek szabályozásában, és különböző rákos megbetegedésekben szerepet játszó oligopeptidáz. Röntgendiffrakcióval meghatározták az ApAPH (*Aeropyrum pernix* K1 enzime) szerkezetét az enzimreakció termékének megfelelő inhibitorokkal komplexben, és oldatkinetikai vizsgálatokat végeztek. Azonosították a szubsztát kötésben részt vevő régiót az enzimen. Bizonyították, hogy az ApAPH az emlős enzimekkel ellentétben endopeptidáz. (Részvétel: 4/9 fő, 40%)

A C1-inhibitor a gyulladási folyamatok fő gátlószere a vérben. Röntgendiffrakcióval meghatározták a szerkezetét, amelynek segítségével magyarázhatók a természetes mutációk hatásai, és lehetővé válik olyan jobb hatású terápiás C1-inhibitor variánsok racionális tervezését, amelyeket pl. az átültetett szervek kilökődésének meggátlásában és az örökletes

angioödéma gyógyításában használhatnak fel. A szerkezet magyarázza a heparin C1-inhibitorral való kölcsönhatásán alapuló gyulladásgátló hatását. (*Részvétel: 1/6 fő, 30%*)

TSG-6 hialuronsav-kötő fehérje, amely gyulladásgátló, ízületi gyulladás- és asztma-ellenes funkciót lát el, valamint az ovulációban is fontos szerepet játszik. A fehérje és a hialuronsav közötti kölcsönhatás pH-függését vizsgálták célzott mutagenézis, NMR spektroszkópai és kalorimetriai módszerek alkalmazásával. (*Részvétel: 1/9 fő, 10%*)

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

2007-ben is folytatódott a kutatócsoport együttműködése az MTA-SzBK Enzimológiai Intézet több kutatócsoportjával, az MTA-ELTE Peptidkémiai kutatócsoporttal és az SZTE Gyógyszerkémiai Intézetével. Az MTA Mezőgazdasági Kutatóintézet, az MTA Kémiai Kutatóközpont és a Veszprémi Egyetem munkatársaival együttműködésben egy-egy publikáció született. Külföldi kapcsolataink közül kiemelendő az ICGEB (Trieszt) támogatása, a dán-kanadai kooperáció, valamint az Oxfordi és Manchesteri Egyetem munkatársaival való együttműködés. Részből szintén külföldön történtek az NMR (Oxford és Manchester) és röntgendiffrakciós kísérletek (DESY, Hamburg).

A kutatócsoport tagjai kötelező és speciális kollégiumok, valamint gyakorlatok tartásával részt vesznek az ELTE vegyész, biológus és kémia PhD-képzésében. A kutatócsoporthoz köthető két diploma és három PhD-disszertáció megszerzése. Vezetésük alatt további öt diákkörös hallgató és hat PhD-hallgató dolgozott.

### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

2007. júliusi kezdettel több OTKA pályázat is indult, amelyekben a kutatócsoport tagjai vezetők: ferrocénszármazékok és heterociklusok szintézise és vizsgálata (K68887), szérin oligopeptidázok (NK67800), immunrendszer fehérjei (F67937). További egy OTKA iskolapályázatban résztvevők (Szerkezeti biológia, NI68466).

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

1. Perczel A, Hudaky P, Palfi VK: Dead-end street of protein folding: Thermodynamic rationale of amyloid fibril formation, *J Am Chem Soc* 129: 14959-14965 (2007)
2. Pallo A, Bencsura A, Heja L, Beke T, Perczel A, Kardos J, Simon A: Major human gamma-aminobutyrate transporter: In Silico prediction of substrate efficacy, *Biochem Biophys Res Comm* 364: 952–958 (2007)
3. Berente I, Beke T, Náray-Szabó G: Quantum mechanical studies on the existence of a trigonal bipyramidal phosphorane intermediate in enzymatic phosphate ester hydrolysis, *Theor Chem Acc* 118: 129–134 (2007)
4. Fábrián B, Kudar V, Csámpai A, Nagy TZ, Sohár P: Synthesis, IR-, NMR-, DFT and x-ray study of ferrocenyl heterocycles from thiosemicarbazones., *J Organomet Chem* 692: 5621–5632 (2007)
5. Miklán Z, Szabó R, Zsoldos-Mády V, Reményi J, Bánóczi Z, Hudecz F: New ferrocene containing peptide conjugates: Synthesis and effect on human leukemia (HL-60) cells., *Biopolymers* 88: 108–114 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	4,7	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,7
PhD, kandidátus: 2	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			25
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			22
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		20
nemzetközi együttműködés keretében: 5	SCI által regisztrált folyóiratban:		20
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 64,268	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		106
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			63
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> : 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 1
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0			<i>ebből</i> külföldön: 0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 8			posztterek száma: 6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 1	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma: 2		Doktori iskolát vezetőik száma: 0	
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> : 0		Gyakorlati kurzusok száma: 0	
TDK munkát készítő hallgatók száma: 2		Diplomamunkát: 3	PhD-t: 8
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			601
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			15 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> : 1		Teljes saját bevétel: 22,6 MFt	
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			17 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> : 0			A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból: 0		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt	
Egyéb: 1		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 5,6 MFt	
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## ELTE GEOLÓGIAI, GEOFIZIKAI ÉS ŰRTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Haas János, az MTA doktora  
1117 Budapest, Pázmány sétány 1/C  
Telefon: 381–2127, Fax : 381–2128  
e-mail: haas@ludens.elte.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatócsoport alapfeladatainak és kutatási tervének megfelelően folytatta kutatásait a Kárpát-medence geológiai szerkezetének és aljzatát felépítő geológiai képződményeinek megismerése és a tágabb régióval való összevetése céljából. Vizsgálták, hogy a földi hőáram-sűrűség területi változását milyen földtani folyamatok okozhatják. Részt vettek az ipari termelésből származó CO<sub>2</sub> felszín alatti tárolókban történő elhelyezésének kutatásában. Alfa- és gamma-spektrometriás méréseket végeztek és továbbfejlesztették az urán-soros radiometriai kormeghatározási módszert és a transzurán izotópok mérés technikáját. Megkezdték a műholdas adatokra épülő eljárások kidolgozását, a szeizmicitással és egyéb geokockázat összefüggő tényezők nyomon követésére.

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

A beszámolási év kiemelkedő eredménye, hogy a kutatócsoport vezetőjének koordinálásával, számos intézmény (Magyar Állami Földtani Intézet, MOL Nyrt, Mecsekérc Zrt) szakembereinek közreműködésével kéziratban elkészült Magyarország új 1:500000-es méretarányú medencealjzat térképe, amely az aljzatot felépítő kőzetek mellett, a fő tektonikai elemeket és az aljzat domborzatát is ábrázolja. A térkép a képződmények értékelését tartalmazó adatbázissal együtt a Magyar Állami Földtani Intézet digitális földtani térmodelljének meghatározó jelentőségű elemét képezi. Elsősorban a felszín alatti vízkészletek felmérésében hasznosul, de szénhidrogén-kutatási jelentősége is számottevő. A tektonikusan gyengült zónák megjelenítése a szeizmikus kockázat-elemzésben is rendkívül lényeges. A kutatócsoport 3 tagja jelentős szerepet vállalt a Pannon-medence és azt körülölelő alpi--kárpáti--dinári hegységvonulatok térréteg térképeihez kapcsolódó cikksorozat, illetve monográfia elkészítésében. A cikksorozat a *Geologica Carpathica* nemzetközi folyóiratban, a monográfia Szlovákiában jelenik meg 2008-ban. Ugyancsak elkészült, Londonban nyomtatás alatt áll a „Geology of Central Europe” c. összefoglaló regionális geológiai kézikönyv, amelynek szerkesztésében a kutatócsoport vezetője vett részt.

OTKA pályázatok támogatásával alapkutatási jellegű rétegtani, szedimentológiai, tektonikai kutatásokat végeztek a Bükk és a Darnó övezet, az Aggteleki--Rudabányai-hegység, valamint a Dunántúli-középhegység területén. A kutatócsoport több tagja részt vett a paleozoikum és a mezozoikum, valamint a triász és a jura időszak határán lezajlott hatalmas globális természeti katasztrófák nyomainak kutatásában. Az eredményeket elismert nemzetközi folyóiratokban publikálták, továbbá brit és kínai kutatókkal együtt újabb terepi kutatásokat végeztek.

Az ország geotermikus adatbázisának elemzésével vizsgálták a földi hőáram-sűrűség területi változásának okait. Az adatbázis elemzése, továbbá modellezések alapján kijelölhetők lesznek a geotermikus energia kiaknázása szempontjából perspektivikus területek, amelyekre további, már ipari jellegű geofizikai és geológiai kutatásokat érdemes végezni. A melegvizet és gőzt villamos energia előállítására, vagy közvetlenül fűtésre, a maradék hőt pedig mezőgazdasági célokra lehet felhasználni. A kutatás gazdasági haszna milliárd forint nagyságrendű és hozzájárulhat a CO<sub>2</sub> kibocsátás csökkentéséhez. Az ENGINE projekt keretében részt vettek a

geotermikus energiakutatás során alkalmazott módszereket tárgyaló kézikönyv (Best Practice Handbook) összeállításában, amely 2008-ban jelenik meg.

A CO<sub>2</sub> felszín alatti tárolásának magyarországi lehetőségeiről tanulmány készült a Miniszterelnöki Hivatal számára. Az eredmények ma még közvetlenül nem alkalmazhatók, további ipari és állami befektetésre van szükség az első ilyen hazai kísérlet beindításához. Középtávon a CO<sub>2</sub> felszín alatti elhelyezése stratégiaileg szükséges és a számítások szerint gazdaságos is lehet, mert CO<sub>2</sub> kvótát lehet vele megtakarítani.

Az ELTE Geofizikai és Űrtudományi Tanszékének munkatársaival együttműködve folytatták a földi litoszféra-lemezeket mozgató földköpeny-konvekció numerikus modellezését. A lemezek egymáshoz viszonyított mozgása miatt felhalmozódó feszültség földrengések kipattanásához vezet, a lemezek egymás alá bukása pedig vulkáni tevékenységet generál. A földköpeny-konvekció tulajdonságainak vizsgálata tehát a geológiai kockázatok jobb megismerését célozza.

A radiometriai laboratóriumban továbbfejlesztették az urán-soros kormeghatározást, kiterjesztve a néhány éves korok tartományára is. Jelentős eredmények születtek a transzurán izotópok mérés technikájának fejlesztésében, ami a környezetvédelmi monitorozás szempontjából rendkívül fontos. A cseppkövek vizsgálatának segítségével történő paleo-szeizmicitás becslést hazai és külföldi területeken is sikeresen alkalmazták.

A kutatócsoport egy tagja közreműködött az ELTE műholdas vevőállomásával rögzített MODIS műholdas felvételek (Aqua és Terra műholdak) termális csatorna adatainak feldolgozását célzó módszerek fejlesztésében. Ennek célja az, hogy földrengésekhez igazoltan köthető felszíni hőanomália monitorozásra alkalmas, operatív távérzékelési eszközt fejlesszen ki. A fejlesztő munka kulcseleme egy olyan új légköri korrekciós eljárás kidolgozása, amely az automatikus tűz-riasztás lehetőségét is magában hordozza.

Geokockázati tényezők globális e.m. monitorozását célozza az előkészítés alatt álló orosz Canopus-Vulkán műholdas mérőrendszer. Ennek első elemén, a technológiai próbaként pályára állított Kompass-2 műholdon sikerrel működött az ELTE irányításával fejlesztett és a BL-Electronics-nál készült, teljes egészében hazai gyártású SAS2-Kompass ULF-VLF mérő- és jelfeldolgozó berendezés. Részt vettek a francia (CNES) DEMETER műhold regisztrátumainak tudományos feldolgozásában. A kutatócsoport részt vett az űr-időjárás jelenségeket is vizsgáló hazai, és magyar vezetéssel globálisan telepített keskeny- és szélessávú VLF mérőhálózat üzemeltetésében, és automata eseménydetektáló eljárások fejlesztésében, amelyeket széles körben alkalmaznak az együttműködő intézmények. Az e.m. monitorozási hw-sw rendszer telepítése a Föld több pontján jelentős tudományos haszonnal is járó export-tevékenységnek tekinthető.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

A kutatócsoport minden munkatársa előadások és gyakorlatok tartásával részt vett az ELTE Földrajz és Földtudományi Intézetének oktatási tevékenységében és a Földtudományi Doktori Iskola munkájában. Az Intézet szinte valamennyi tanszékével együttműködtek különböző kutatási feladatok megoldásában, különösen szoros volt a kutatási együttműködés a Geofizikai és Űrtudományi Tanszékkel.

A kutatás, az oktatás és a továbbképzés területén is aktív együttműködés folyt a MOL Nyrt-vel. Igen szoros volt a munkakapcsolat a Magyar Állami Földtani Intézettel, elsősorban földtani térképszerkesztési feladatok tekintetében, a Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézettel a CO<sub>2</sub> projektet, valamint obszervatóriumi méréseket illetően. Közös kutatási

projektjeik voltak az MTA Geokémiai Kutatóintézetrel. A radiometriai labor rendszeres munkakapcsolatban állt a BME Nukleáris Technikai Intézetével és az MTA Izotópkutató Intézetével. Konzorciális együttműködés keretében dolgoztak az MTA Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézetrel, elsősorban a hullámterjedési, ELF-VLF vizsgálatok és az űr-időjárás kutatás területén.

MTA kétoldalú együttműködés keretében szerb és szlovák akadémiai és egyetemi intézetekkel folytatták a paleozoos és mezozoos kőzetek összehasonlító kutatását és a régiót felépítő terelemek vizsgálatát. TÉT pályázat keretben osztrák és lengyel partnerekkel működtek együtt szedimentológiai, illetve magnetosztatográfiai kutatásokban. A hullámterjedés és ELF-VLF vizsgálatok terén szorosán együttműködtek francia, dél-afrikai, orosz, ukrán, indiai, új-zélandi, amerikai (USA) és brit kutatóhelyekkel. A műholdas távérzékelésben a US Department of Agriculture volt a legfontosabb partner intézmény.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

MTA-MEH Stratégiai Pályázat (2006–2007): „Az ipari tevékenységből származó széndioxid hosszú távú elhelyezésének lehetőségei Magyarországon” című projekt tanulmány készítésével lezárult. ENGINE, (Enhanced Geothermal Innovative Network for Europe), Európai Unió VI. keretprogram (2006–2008) keretében értekezleteken és konferencián vettek részt, készülöben van a Best Practice Handbook.

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

1. Ferencz, OE, Ferencz, Cs, Steinbach, P, Lichtenberger, J, Hamar, D, Parrot, M, Lefeuvre, F, Berthelie, J-J: The effect of subionospheric propagation on whistlers recorded by the DEMETER satellite - Observation and modelling. *Ann. Geophys.* 25 (5), pp. 1103-1112 (2007)
2. Galsa, A, Lenkey, L: Quantitative investigation of physical properties of mantle plumes in 3D numerical models. *Physics of Fluids*, 19, 116601, DOI: 10.1063/1.2794284 (2007)
3. Haas, J, Demény, A, Hips K, Zajzon N, Weiszburg TG, Sudar M, Pálffy J: Biotic and environmental changes in the Permian–Triassic boundary interval recorded on a western Tethyan ramp in the Bükk Mountains, Hungary – *Global and Planetary Change*. 55, 136–154 (2007)
4. Harangi Sz, Lenkey, L: Genesis of the Neogene to Quaternary volcanism in the Carpathian-Pannonian region: Role of subduction, extension, and mantle plume. In: Beccaluva, L, Bianchini, G, Wilson, M, eds.: *Cenozoic Volcanism in the Mediterranean Area*. Geological Society of America Special Paper, 418, 67–92, doi: 10.1130/2007.2418(04).
5. Pálffy, J, Demény, A, Haas, J, Carter, ES, Görög, Á, Halász D et al.: Triassic–Jurassic boundary events inferred from integrated stratigraphy of the Csővár section, Hungary. – *Palaeogeogr., Palaeoclimat., Palaeoecology.*, 244, 11–33 (2007)
6. Varga, Zs, Surányi, G, Vajda N, Stefánka Zs: Determination of plutonium and americium in environmental samples by inductively coupled plasma sector field mass spectrometry and alpha spectrometry. *Microchemical Journal*, 85, 39–45 (2007)
7. Varga, Zs, Surányi G: Production date determination of uranium-oxide materials by inductively coupled plasma mass spectrometry. *Anal. Chimica Acta* 599, 16–23 (2007)



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			29
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			29
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	11
nemzetközi együttműködés keretében:	10	SCI által regisztrált folyóiratban:	11
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	17,806	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	135
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			115
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	5
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	3	posztterek száma:	11
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	0	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	0	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	2
			57
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			28 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	24,7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			7
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			2
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,5 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## ELTE PEPTIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Hudecz Ferenc, az MTA doktora  
1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/A., 1518 Budapest, Pf.32.  
Telefon: 372–2828, Fax: 372–2620  
e-mail: fhudecz@ludens.elte.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Biológiailag aktív peptidek és peptid konjugátumok tervezése és szintézise, szerkezet-hatás vizsgálatok, terápiás alkalmazás és diagnosztikumok kifejlesztésének céljából. Olyan nagy specifitású peptid-antigének, illetve gyógyszerhatóanyagok kifejlesztése, amelyek hozzájárulhatnak olyan sokakat érintő betegségek korai diagnózisához és gyógyításához, mint például a rák, TBC, Alzheimer-kór, reumatoid arthritis, herpesz fertőzés.

A kutatási tevékenység három témára koncentrálódik:

- Rákkemoterápiai kutatások: A gyógyászatban alkalmazott daganatgátló szerek konjugátumainak szintézise célfelismerő/célbajuttató oligo- és polipeptidek felhasználásával, amelyek elősegítik a gyógyszermolekulák tumorsejt specifitását, ezáltal csökkentve azok toxikus mellékhatásait. A konjugátumok *in vitro* és *in vivo* tumorelles hatásának vizsgálata és hatásmechanizmusuk feltérképezése.
- TBC kutatások: A *Mycobacterium tuberculosis* fertőzöttség korai kimutatása lineáris peptid epitópokra illetve ezek oligo- vagy polipeptid hordozóhoz kapcsolt konjugátumaira épülő teszt módszerrel, amelyek alkalmasak más fertőzések (pl. HIV) keresztreakcióinak kiszűrésére is. A TBC kezelésre bevált, illetve *in silico* módszerrel kiválasztott és hatékonyan bizonyult kismolekulák specifitásának növelése peptidkonjugátumaik előállításával.
- Immunkémiai kutatások: A fent felsorolt betegségekhez kapcsolódó fehérjékből származó és módosított mesterséges peptid alapú “szuperantigének” szintézise diagnosztikai és szintetikus oltóanyag (vakcina) kifejlesztése céljából. A célfehérjék: mucin (MUC1, MUC2) glikoproteinek (rák), Herpes simplex vírus D glikoprotein, hősokk fehérjék, filaggrin (reumatoid arthritis), béta-amiloid (Alzheimer-kór).

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

Előállították a GnRH-III (Pyr-His-Trp-Ser-His-Asp-Trp-Lys-Pro-Gly-NH<sub>2</sub>) daunomicinnel és doxorubicinnel készült konjugátumait. Vizsgálták a hormon és gyógyszermolekulát összekapcsoló kötés (amid, észter, oxim, hidrazon) szerepét a tumorelles hatás szempontjából. Az oxim-kötést tartalmazó konjugátum *in vivo* vizsgálata bizonyította, hogy a drog a konjugátumban is megtartotta tumorelles hatását, de kivédhető volt a kardiotoxikus mellékhatása. (a kutatásban résztvevő összes kutatók száma/ ebből a kutatócsoport tagjai: 7/5) Bizonyították, hogy a GnRH-III dimer származékai nemcsak *in vitro*, de *in vivo* is hatásosabban tumorelles szerek, mint az alapvegyület. A hormon dimer származékai i.p. adagolással közel 50%-os gátlást eredményeztek a C26 vastagbél tumor növekedésében. (8/4, szabadalom benyújtás alatt)

Előállítottak különböző hosszúságú oligoarginint (4,6,8 Arg egység) tartalmazó daunomicin konjugátumokat szukcinil vagy négyszógsav linkerrel a daunozamin aminocsoportján keresztül. Vizsgálták a konjugátumok *in vitro* citosztikus hatását és sejtbejutását szentitív és rezisztens humán leukémia tumorsejtvonalakon (HL-60). Megállapították, hogy a konjugáció

típusa és az oligoarginin lánc hossza változó módon, de jelentősen befolyásolja a konjugátumok tumorelles hatását. Megállapították, hogy a konjugátumok kisebb mértékben, de hatásosak rezisztens tumor sejteken is. (3/3)

Makromolekuláris hordozóhoz kapcsolt daunomicin illetve metotrexát sejt felvételi folyamatát vizsgálták J774 egér makrofág és MonoMac6 humán monocita sejt vonalakon. Megállapították, hogy a J774 sejtek a polianionos cAD-SuccEAK konjugátumot vették fel nagyobb mértékben, míg a MonoMac6 sejtekbe a polikationos cAD-SAK konjugátum jutott be leghatékonyabban. A konjugátumok felvétele koncentráció- és hőmérsékletfüggőnek bizonyult. (3/3)

A *Mycobacterium tuberculosis* fertőzöttség korai kimutatásához szintetikus lineáris peptideket készítettek (ESAT-6, CFP-10 fehérjékből), míg a 16 kDa fehérjéből származó epitóp peptid származékát makromolekuláris hordozókhoz (elágazó láncú polipeptid, tetratuftsin) kapcsolták. A peptidek és konjugátumok által kiváltott hatást *in vitro* teljes véren illetve perifériás vérből preparált PBMC (periferial blood mononuclear cells) sejteken határozták meg, ELISA, ELISPOT tesztek és áramlási citométer alkalmazásával. (6/3)

Jelenleg alkalmazott és *in silico* módszerrel kiválasztott potenciális antituberkulotikumok mycobactericid hatását vizsgálták, és egyes, hatékony szerves kismolekula konjugációját valósították meg a hatóanyag oldékonyságának növelése és sejtbejutásának fokozása érdekében. (6/3)

Megállapították, hogy a szervezetben a beta-amiloid ellen termelődő ellenanyag a peptid 21-37 szakaszát ismeri fel. A szervezetben termelődött ellenanyag kvantitatív mérésére ELISA módszeren alapuló diagnosztikai eljárást dolgoztak ki. A hatékony ellenanyag felismeréshez számos konjugátumot készítettek, amelyekben az A $\beta$ -21-37 szekvencia oligotuftsin (Ac-[TKPKG]<sub>4</sub>-NH<sub>2</sub>) hordozóhoz kapcsolódik különböző számban és orientációban. Ezen konjugátumok segítségével optimalizálták a kimutatási eljárást. (3/1, szabadalom benyújtás alatt)

Előállítottak szérumban ELISA mérésekre alkalmas filaggrin, vimentin és kollagén peptideket tartalmazó „Multipin” peptid tartart. A kiválasztott peptideket 100-100 szérumban mintával (RA, SLE, OA) vizsgálták, a felismerés szelektivitását és specificitását elemezték. (4/2)

Autoimmun betegségek kezelésére bispecifikus konjugátumokat fejlesztettek ki. Ezek a B-sejt-receptor és az Fc $\gamma$  receptor kereszt kötése révén alkalmasak lehetnek a B-sejt aktiváció gátlására. (6/3)

Lineáris, ciklikus, D-aminosavat tartalmazó epitópok és konjugátumok lebomlását vizsgálták humán szérumban, illetve patkánymáj lizoszóma-preparátumban. A bomlásprofil alapján javaslatot tettek a hasítást végző enzimekre vonatkozóan. (3/3)

Új módszert dolgoztak ki tetraetilén-glikol alapú spacer molekula előállítására, melyben tetraetilén-glikol diamintól és borostyánkősav-anhidridből egy lépésben, kapcsolószer nélkül állítottak elő amino és karbonsav funkciókat tartalmazó TEG építőelemet. A molekula védett változata aminosav-származékként alkalmazható peptidszintézis során. Segítségével peptidek vízoldékonysága jelentősen fokozható. (3/3)

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok: ELTE Szerves Kémiai Tanszék, Immunológiai Tanszék, Biokémiai Tanszék; Matematikai Tanszék, BME, Szerves Kémiai Tanszék; SE Biofizikai és Sugáregészségügyi Intézet, Immunológiai, Sejtbiológiai és Genetikai Intézet, Gyógyszerhatástani Tanszék, 3. sz. Belgyógyászati Klinika, Központi Immunológiai

Laboratórium; Pécsi Tudományegyetem Immunológiai és Biotechnológiai Intézet; Anatómiai Intézet, Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék; Országos Onkológiai Intézet; MTA Kémiai Kutatóközpont; MTA KOKI; MTA SZBK Biokémiai Intézet, Enzimológiai Intézet; ORFI; Richter G. Vegyészeti Gyár Rt; REANAL; Diagon Rt.

Nemzetközi kapcsolatok: Department of Experimental and Health Sciences, Pompeu Fabra University, Barcelona; Cell Biology, Purpan Medical School, Toulouse III University, France, Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, Konstanz University, Konstanz, Germany; Department of Medical Microbiology, University of Groningen, Groningen, The Netherlands; Department of Molecular Pathology, University of Palermo, Palermo; Institute of Food Science and Technology CNR, Avelino, Italy; Department of Chemistry, University of Ioannina, Ioannina, Greece; Department of Pathology, Oxford University, Institute of Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan, A.I. Cuza University, Iasi, Romania.

Oktatás: PhD témavezetés (8 fő), V. éves diploma-témavezetés (3 fő), tudományos diákköri témavezetés dolgozattal (5 fő). Fő- és speciális kollégiumok, gyakorlatvezetés (biológus, vegyész, tanárszak), PhD előadássorozatok. Előadások tanár továbbképzés keretében. ERASMUS Oktatói és Hallgatói Mobilitás (Konstanz-i Egyetem, 1-1 fő).

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

GVOP-AKF: A csoport két programban vett részt (autoimmunbetegségek diagnosztikája, valamint Uracil-DNS endonukleáz molekuláris biológiai alkalmazásai témakörben) (közreműködők), amelyeket 2007-ben sikeresen befejeztek. OTKA: Két új program indult (témavezető), négy téma kutatása folytatódott (tumor terápia, TBC és autoimmun betegségek diagnosztikája és terápiája témakörökben); Két ETT pályázat, amely tumorelleses hatóanyagok szelektivitásának növelését tűzte ki célul, eredményesen folytatódik. Két TÉT program fejeződött be a partnerek megelégedésére és új együttműködési lehetőségek figyelembevételével: A Magyar-Román (témavezető) Magyar-Olasz (témavezető). A Magyar-Francia (témavezető) és a Magyar-Dél-Afrikai program folytatódik.

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

1. Banóczy Z, Tantos A, Farkas A, Tompa P, Friedrich P, Hudecz F: Synthesis of cell-penetrating conjugates of calpain activator peptides. *Bioconjug Chem.* 18: 130-7. (2007)
2. Mező G, Czajlik A, Manea M, Jakab A, Farkas V, Majer Z, Vass E, Bodor A, Kapuvári B, Boldizsár M, Vincze B, Csuka O, Kovács M, Przybylski M, Perczel A, Hudecz F: Structure, enzymatic stability and antitumor activity of sea lamprey GnRH-III and its dimer derivatives. *Peptides*, 28: 806-20 (2007)
3. Miklán Z, Szabó R, Zsoldos-Mády V, Reményi J, Bánóczy Z, Hudecz F: New ferrocene containing peptide conjugates: synthesis and effect on human leukemia (HL-60) cells. *Biopolymers*, 88: 108-14 (2007)
4. Tőke O, Tugyi R, Uray K, Hudecz F: Solution structure of the all L- and D-amino acid-substituted mucin 2 epitope peptides. *Bioch. Biophys Res Commun.*, 358: 739-42 (2007)
5. Udvarnoki K, Cervenak L, Uray K, Hudecz F, Kacs Kovics I, Spallek R, Singh M, Füst G, Prohászka Z. Antibodies against C-reactive protein cross-react with 60-kilodalton heat shock proteins. *Clin Vaccine Immunol.*, 14: 335-41 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	9	Ebből kutató <sup>2</sup> :	7
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			36
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			36
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	16
nemzetközi együttműködés keretében:	19	SCI által regisztrált folyóiratban:	16
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	44,883	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	188
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			139
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	18
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	12	posztterek száma:	7
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	4	Gyakorlati kurzusok száma:	3
TDK munkát készítő hallgatók száma:	6	Diplomamunkát:	3
		PhD-t:	9
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			442
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			34 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	78,8 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			8
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			9
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	24,7 MFt
Egyéb:	8	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,4 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,3 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	17,7 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

# ELTE STATISZTIKUS ÉS BIOLÓGIAI FIZIKA KUTATÓCSOPORT

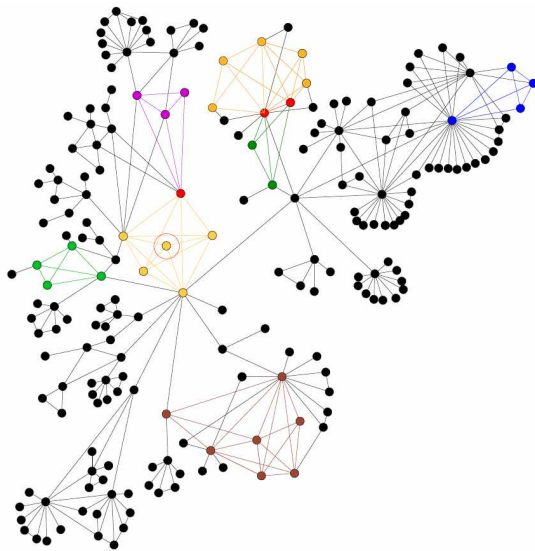
Vezető: Vicsek Tamás, az MTA rendes tagja  
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A  
Telefon: 372-2795, Fax: 372-2757  
e-mail: vicsek@angel.elte.hu

## I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatócsoport ebben a formájában 2007-ben jött létre két korábbi kutatócsoport egyesülése révén. 2007 évi fő feladat az új szerkezetű kutatócsoport működésének beindítása, összehangolása és a korábban megkezdett kutatások eredményeinek fontos nemzetközi folyóiratokban való publikálása, és az esetenként hozzájuk társuló programcsomagok fejlesztése volt. A korábban elnyert pályázatok által lehetővé tett alkalmazások útján átmenetileg bővült létszámú kutatócsoport eredményes munkával a fenti célokat elérte.

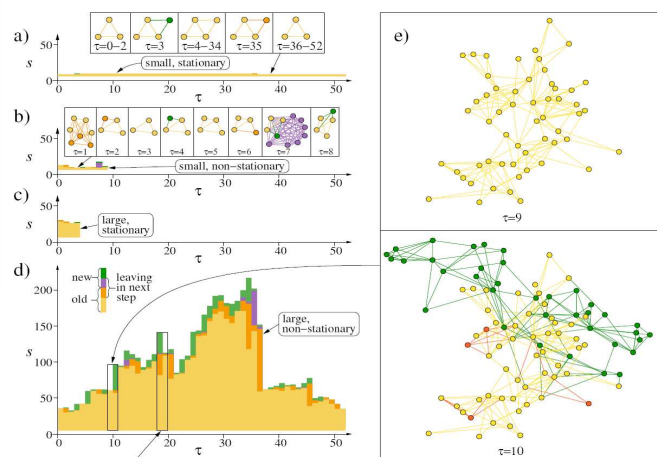
## II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények, azok gazdasági-társadalmi haszna

Meghatározták több, rendkívül nagy (pl. 4 millió személy telefonhívásainak gyakoriságára vonatkozó adatokat tartalmazó) társas hálózatok moduláris szerkezetét, és annak időbeli fejlődését. Kimutatták, hogy a hálózati csoportosulások stabilitásának közepes csoportméretek esetében feltétele a tagok számának kellő mértékű fluktuációja. A kutatók együttműködési hálózatának statisztikai adatok alapján történt kvantitatív kiértékelése indikálta, hogy a kutatói közösségek együttműködésének van egy optimális szintje. 2+1 fő, 3 M Ft csoport, 1 M Ft külső támogatás.



A kis kutatócsoportok akkor stabilak, ha nem fluktuál a taglétszám. Nagy csoportok esetében a helyzet fordított, a bal alsó ábrán látszik, hogy a sok fluktuáció ellenére a csoportosulás tartósan fennmarad.

4 millió mobiltelefont használó személy hívási hálózatának parányi részlete. Különböző struktúrákban, gyengén csatolt, vagy csoportokban található felhasználókat tartalmaz a gráf. A hálózat időfejlődéséből következtetni lehet az egyes csoportok dinamikájára (pl. megszűnésüket előre lehet jelezni).



Egy korábban publikált eljárásukból kiindulva kifejlesztettek két újabb algoritmust, amelyek immár lehetővé teszik a súlyozott, valamint az irányított hálózatok komplex belső struktúrájának feltárását a bennük fellelhető csoportosulások beazonosítása útján. 4+1 fő, 4 M Ft csoport, 1 M Ft külső támogatás

Kifejlesztettek egy keretrendszert, amelyik különösen alkalmas nagyon nagy társas és biológiai hálózatok főbb tulajdonságainak meghatározására. Ezzel a szoftverrel könnyen feltárhatóak a hálózatokban különböző szempontokból kulcsfontosságú szerepet játszó egységek. Megmutatták, hogy pl. az információterjedés szempontjából fontos csúcsok tipikusan egyszerre több csoportosuláshoz is tartoznak. 2+1 fő, 1 M Ft csoport, 0,5 M Ft külső támogatás.

A kollektív mozgás alapmodelljében vizsgálták a sebesség és a perturbációk jellegének hatását a rendezett mozgásba való átmenet jellegére. Megmutatták, hogy az átalakulás és a csoportos mozgás jellege függhet a modellekben használt sebesség jellegű mennyiség értékétől. 2+1 fő, 1 M Ft csoport, 3,5 M Ft külső támogatás

Továbbfejlesztették a korábban elkészült mini-inkubátor vezérlőprogramját. 1+2 fő, 1 M Ft csoport, 2 M Ft külső támogatás

Kidolgozták a kompakt csillagok egy típusának, a magnetároknek extrém erősségű mágneses terében mozgó protonok és ionok koherens töltött pion sugárzásának kváziklasszikus elméletét. Befejezés előtt áll a Penn State University, USA két kutatójával közös kutatás a magnetárok környezetében keletkező pionok foton- és neutrínósugárzásának észlelhetőségéről az ICECUBE (Antarktisz) detektornál. (2 fő)

Effektív kvark-mezon modellek Dyson-Schwinger egyenleteinek segítségével kidolgozták az erősen kölcsönható anyag fázisdiagramját véges barionikus, izospin-, és ritkaság-töltéssűrűség egyidejű esetére. Ugyanezzel a kvantumtérelméleti eljárással új szimmetriasértési mechanizmust javasoltak a Standard Modell kiterjesztett Higgs szektorára. (3 fő)

Általánosan megfogalmazták az univerzalitás leírását inhomogén (csapdázott) szuperfolyékony Fermi-gázban az ú.n. unitaritási limeszben, amikor a kölcsönható atomok szórási hossza végtelenné válik. Kimutatták, hogy az inhomogén gázban már nem lesz igaz, hogy a sűrűség arányos a kölcsönhatás nélküli gáz sűrűségével, de az eltérés univerzális számokkal jellemezhető. Csapdázott fermionok egy-héj modelljében algebrai és numerikus módszerekkel vizsgálták az alapállapot energiája és az alapállapot szerkezetét a különböző héjjellemzők függvényében. Az találták, hogy  $s > 1/2$  esetén egy klaszter alapállot valósul meg, mert a Cooper-párokából álló állapot magasabb energiájú ebben a modellben. (2 fő)

#### *Társadalmi hasznosulás*

*A hálózatkutatói eredmények társadalmi hasznosítása megkezdődött.* A csoport hálózatokkal foglalkozó tagjai együttműködnek egy piaci tanácsadó céggel (Gordio), és egy közhasznú alapítvánnyal (Körvonal), amelyek szervezetfejlesztési feladatokat végeznek nagy cégeknél, az alkalmazottak kapcsolati hálójának analízise segítségével. Egy sikeres szervezetfejlesztés eredményeképpen a cégek hatékonyabban tudnak működni, és a kollégák kapcsolata, közérzete, informáltságának szintje is sokat javul.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

A kutatócsoport szoros együttműködésben van több hazai és külföldi kutatóhellyel. Az alábbiakban csak azokat sorolom fel, amelyek keretében publikáció is született, ill. készülöben van.

*Hazai együttműködések:* Sejtbiológiai vonatkozású kutatások terén együttműködnek Dr. Madarász Emilia csoportjával (MTA KOKI).

*Nemzetközi együttműködések:* Prof. Barabási Albert-László csoportjával (University of Notre Dame, USA), Prof. Oltvai Zoltánnal (University of Pittsburgh, USA), Prof. Andrea Cavagna (Universita de la Sapienza, Róma, Olaszország) Háromoldalú kutatási együttműködését folytattak a Graz-i Karl Franzens Egyetem és a zágrábi Rudjer Boskovic Intézet, valamint a Zágrábi Egyetem kutatóival. Ennek keretében 2 műhelyt szerveztek Magyarországon, egyet pedig Horvátországban. A Penn State University két kutatójával közös kutatásokat folytattak.

A nemzetközi kapcsolatokhoz tartozik, hogy a csoport vezetője szerkesztő bizottsági tag a *Fractals* és a *Physica A* című folyóiratoknál.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A kutatásokhoz az OTKA T-046129 pályázatból 2 M Ft-ot, a HR-045 horvát-magyar TÉT pályázatból 1 M Ft-ot használtak fel. 2007-ben résztvevőként elnyertek 1 OTKA-iskola és 1 OTKA tematikus pályázatot. A hálózatos kutatásokhoz kapcsolódva elnyertek egy döntéselőkészítési kutatási konzorcium tagjaként 42 M Ft-ot (NKTH, Jedlik).

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

1. Nagy M, Daruka I, Vicsek T: New aspects of the continuous phase transition in the scalar noise model (SNM) of collective motion, *Physica A* 373 (2007) 445–454
2. Palla G, Barabasi A-L, Vicsek T: „Quantifying social group evolution”, *Nature*, 446 664–667 (2007)
3. Palla G, Farkas IJ, Pollner P, Derényi I, Vicsek T: Directed network modules, *New J. Phys.* 9 (2007) 186 doi:10.1088/1367-2630/9/6/186
4. Farkas I, Ábel D, Palla G, Vicsek T: Weighted network modules, *New J. Phys.* 9 (2007) 180 doi:10.1088/1367-2630/9/6/180
5. Palla G, Derényi I, Vicsek T: The critical point of k-clique percolation in the Erdos-Renyi graph *J. Stat. Phys.* 128 (1-2) (2007) 219–227
6. Palla G, Barabasi A-L, Vicsek T: Community dynamics in social networks, *Fluct. Noise Lett.* 7 (2007) L273 - L287
7. Patkós A, Szép Zs: Phase structure and phase transitions of the  $SU(2) \times O(N)$  symmetric scalar field theory, *Europh. Lett.* 79 51001 (2007)
8. Cserti J, Csordás A, Dávid Gy: Role of the trigonal warping on the minimal conductivity of bilayer graphene, *Phys. Rev. Lett.* 99, 066802 (2007)

#### *Szabadalom*

A Magyar Szabadalmi Hivatalhoz P0700362 ügyszámon a köv. című találmányt nyújtottuk be: „Eljárás és inkubátor élő sejtek mikroszkópos megfigyeléséhez”.

Feltalálók: 25-25%-os mértékben: Csiszér Miklós, Selmeczi Dávid, Szabó Bálint, Vicsek Tamás.



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	10	Ebből kutató <sup>2</sup> :	8
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	2
			5
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			17
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			14
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	6	idegen nyelven:	11
nemzetközi együttműködés keretében:	3	SCI által regisztrált folyóiratban:	14
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	61,176	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	174
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			174
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	15	posztterek száma:	5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	5	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	7	Gyakorlati kurzusok száma:	2
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	4
			25
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			31 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,9 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,8 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## ME ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Roósz András, MTA levelező tagja  
3515 Miskolc-Egyetemváros, Anyagtudományi Intézet  
Telefon: (46) 565–111/15–43, Fax: (46) 565–201  
e-mail: femroosz@gold.uni-miskolc.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Réz alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása;  
A szilárdoldatok kristályosodást leíró szoftver csomag fejlesztése;  
Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre.

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

#### *Réz alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása*

A Cu alapú tömbi amorf anyagok kutatását az irodalom kritikai átvizsgálásával kezdték. Az irodalomban fellelhető több, mint 200 ötvözet adatainak összegyűjtése után az amorf képződésre vonatkozó kritériumok teljesülését vizsgálták meg ezen ötvözetekre. A számításokból azt a következtetést vonták le, hogy a kritériumok nem alkalmazhatók a Cu alapú tömbi amorf anyagokra csak erős megszorításokkal, mert a kritériumok nem veszik figyelembe a kristályosodó fázisokat, és azok túlhűthetőségét, valamint a szerzők is gyakran nem teljesen körültekintően adják meg a mérés körülményeit, így egymásnak ellentmondó adatok is találhatóak. Az irodalmi áttekintés alapján többféle úton állítottak elő tömbi amorf anyagot. Az első módszernél centrifugál öntéssel ék alapú próbákat készítettek, és meghatározták, hogy maximálisan mekkora az amorf anyag vastagsága, és ott mekkora volt a hűlési sebesség a szekunder dendritág távolság mérés alapján. A második módszernél CuZrAl és CuZrAlY mesterötvözeteken folyamatos és impulzus üzemmódú NdYAG lézerberendezéssel hoztak létre amorf felületi réteget. A harmadik módszer esetében a CuZrTiAg mesterötvözetet 2 órai őrléssel teljesen amorf állapotúvá sikerült átalakítani golyósmalomban. A negyedik módszer a hagyományos vékony szalag gyártás volt (melt spinning), mellyel CuMmAl összetételű amorf szalagot állítottak elő. A négy módszerrel előállított amorf anyagok termikus vizsgálatát differenciális scanning kaloriméterrel végezték el, meghatározták az amorf anyagokra jellemző termikus paramétereket, mint például az üvegesedési hőmérsékletet, a kristályosodás kezdő hőmérsékletét, a kristályosodás aktiválási energiáját.

A kutatások első évében még nem beszélhetünk a közvetlen gazdasági haszonról. Társadalmi haszon, hogy ezen a rendkívül perspektivikus területen kialakult egy fiatalokból álló kutatócsoport, amely csoport teljes állású tagjai mindnyájan rendelkeznek PhD fokozattal. Társadalmi vonatkozásban különös jelentőségű, hogy mindannyian nők. Létrejött a kutatási infrastruktúra, kialakultak a hazai és nemzetközi kutatási kapcsolatok. Az *MTA támogatás 100%-át fordították a fenti kutatás finanszírozására.*

#### *Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre*

A projekt keretén belül végzett kutatómunkának három fő iránya volt.  
(a) A meglévő egyirányú kristályosító berendezés továbbfejlesztése;

- (b) A továbbfejlesztett kristályosító berendezéssel elvégzett új kristályosítási kísérletek;
- (c) A kristályosítás során kialakult szövetszerkezet jobb megértése céljából MHD kísérletek végrehajtása szobahőmérsékleten, eutektikus összetételű Ga-In ötvözetel.
- (a) Az MHD (magneto-hidrodinamikai) keverő villamos paramétereinek és az üzem közbeni hőmérsékletének folyamatos regisztrálására felszereltek egy új mérőegységet. Elkészítettek egy olyan berendezést, amely a kristályosítás folyamán az MHD keverőt vezérli. Ezzel a vezérléssel megoldható, hogy a kristályosítás alatt a fémolvadék forgásba hozható, illetve leállítható legyen, valamint az, hogy a fémolvadék fogási iránya változhasson. Az MHD keverő így a kristályosítás közben előre beállított ideig üzemel, illetve előre beállított ideig kikapcsolt állapotban van. Szükség esetén az MHD keverés forgásirányát is megváltoztathatják egy előzetesen meghatározott ki- és bekapcsolási frekvencia szerint.
- (b) A kristályosítási kísérletek során Al<sub>7</sub>Si<sub>1</sub>Fe ötvözetet használták. A kristályosító berendezéssel - mivel a kristályosítás során a frontsebesség, a hőmérséklet gradiens és az MHD keverő forgó mágneses terének változtatgatására, esetleges ki- és bekapcsolgatására mód van - sokféle kristályosítási körülmény beállítható. A különféle körülmények között kristályosított ötvözetek szövetszerkezete ezáltal széles tartományban változhat. A kísérleteik célja ezen változások kiértékelése.
- (c) A kristályosítás közben létrejövő szövetszerkezet kialakulásáért a frontsebességen és a hőmérséklet gradiensen kívül az olvadákáramlás is felelős. Ennek modellezésére elkészítettek egy szobahőmérsékletű Ga-In ötvözetet alkalmazó MHD keverő berendezést és az olvadákáramlás sebességének meghatározására szolgáló mérőegységet. Ezen mérőesorozat alapján pontosítani lehet azokat a hasonlósági kritériumokat, amelyek alapján összehasonlíthatók a különböző laboratóriumokban eltérő körülmények között végrehajtott kristályosítási kísérletek eredményei. *A PRODEX támogatás 75%-át fordították a fenti kutatás finanszírozására.*

#### *Egyensúlyi fázisdiagramok közelítő számítása ESTPHAD módszerrel*

Az egyensúlyi fázisdiagram vonalait illetve felületeit számító ESTPHAD rendszerhez eddig az adatbázist a mért, számított illetve grafikusán ismert adatok EXCEL-lel való feldolgozása útján nyerték. Az eljárás így csak korlátozott mértékben volt használható azt részleteiben nem ismerő kutatóknak. Annak érdekében, hogy bárki könnyen használni tudja a rendszert saját feladatának megoldásához, egy szabadon felhasználható szoftvert dolgoztunk ki, amely képes az adatokat önállóan feldolgozni, kiszámítani az adatbázis létrehozásához szükséges állandókat, azokat az adatbázisba elmenteni és a számított diagramokat megjeleníteni. A szoftver alkalmas az adatbázisban való keresésre, valamint lehetőség nyílik olyan szoftver részek letöltésére, amelyeket a szimulációs programba építve bárki ki tudja számítani az egyensúlyi fázisdiagramok adatait. A szoftver és az adatbázis a [www.matsci.uni-miskolc.hu/estphad](http://www.matsci.uni-miskolc.hu/estphad) honlapról szabadon letölthető. A szoftvert az Au-Ag-Pd egyensúlyi fázisdiagram adatai segítségével tesztelték. Folytatták az oxid kerámiák két és háromalakotós egyensúlyi fázisdiagramjainak feldolgozását. Az előző évek munkálatai során tapasztalták, hogy különösen a háromalakotós egyensúlyi fázisdiagramok vonalai rendkívül pontatlanok, számos esetben egyszerűen „költöttek”. A pontatlanságok kiküszöbölése érdekében azokban az esetekben amikor az eredeti mért értékek megtalálhatók voltak, azok felhasználásával újra kiszámították a diagramokat. Az előző években EXCEL-lel feldolgozott diagramokat a kidolgozott szoftverrel újra számolták és az egyes fázisdiagramok paramétereivel az adatbázis kiegészítették. Jelentős előrelépés történt a nyílt maximummal kristályosodó

vegyületet tartalmazó valamint a peritektikus és a monotektikus diagramok feldolgozása területén. A PRODEX támogatás 25%-át fordították a fenti kutatás finanszírozására.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológia Intézet (BAY-ATI); Bay Zoltán Nanotechnológia Kutatóintézet (BAY-NANO); Schmelzmetal Kft.; Prof. Dr. G. Müller, CGL, Erlangen; Prof. D. Camel, CEA, Grenoble; Prof. H. Jones, DEM, Sheffield; Prof. Dr. Y. Fautrelle, MADYLAM, Grenoble; Prof. Dr. L. Ratke, DLR, Cologne; Dr. G. Zimmermann, ACCESS e.V., Aachen

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

MICAST III Hungary, Európai Űrügynökség PRODEX program, 2+2 éves projekt.

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

1. Janovszky D, Sólyom J, Roósz A, Czigány Zs: Crystallization of Fe-Ni Based Amorphous Alloy, Materials Science Forum Vols. Vols.537–538 pp.185–190 (2007)
2. Rónaföldi A, Kovács J, Roósz A: Investigation and Visualisation of Melt Flow Under Rotating Magnetic Field, Trans. Indian Inst. Met. Vol.60, Nos. 2-3, April-June 2007, pp. 213–218
3. D.Janovszky, J.Sólyom, A. Roósz: Identification of metastable phases in Fe-Ni based amorphous alloy, Int. J. Microstructure and Materials Properties, Vol. 2, Nos. 3/4, pp.420–428 (2007)
4. Rónaföldi A, Kovács J, Roósz A: Visualisation of Melt Flow Under Rotating Magnetic Field, Materials Science Forum Vols. 537–538, pp. 591–598 (2007)
5. Roosz A, Barkóczy P, Farkas J: The ESTPHAD: a Simple Tool for the Simulation of Solidification of Multicomponent Alloys, SP'07 Proceedings of the 5<sup>th</sup> Decennial International Conference on Solidification Processing, Sheffield, July 2007, pp. 365–368

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: ME Anyagtudományi Kutatócsoport

Átlagléttség <sup>1</sup> :	8	Ebből kutató <sup>2</sup> :	7
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			23
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			23
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	16
nemzetközi együttműködés keretében:	0	SCI által regisztrált folyóiratban:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	7	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	38
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			530
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	3	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	15	posztterek száma:	20
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			9
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	2	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	0	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	6
			210
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			0 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## ME MŰSZAKI FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Lakatos István, az MTA levelező tagja  
3515 Miskolc-Egyetemváros, Pf. 2.  
Telefon: (46) 565–255, Fax: (46) 363–349  
e-mail: lakatos@akki.hu,

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Műszaki Földtudományi Kutatócsoport elsődleges feladata olyan termelési és ehhez kapcsolódó geotechnikai eljárások elméleti megalapozása, amely lehetővé teszi a természeti erőforrásokkal történő nagy hatásfokú, gazdaságos és környezetbarát gazdálkodást, az importfüggőség csökkentését és az ellátottság nemzetgazdaság szintű javítását. Metodikai szempontból a tervezett kutatási projektek egységet képeznek a különböző tudományágak, így a geofizika, a bányászati tudományok, a kémiai tudományok, környezettudomány stb. hozzájárulása mellett. A Kutatócsoport K+F tevékenységének súlypontját az alábbiak képezték:

1. természeti erőforrások feltárását, támogatását célzó geofizikai kutatások;
2. geotechnikai módszerek és integrált technológiák fejlesztése;
3. konvencionális és nem konvencionális szénhidrogének hatékony kitermelését biztosító eljárások megalapozó kutatások.

A kutatás-fejlesztés súlypontját 2007-ben a konvencionális geofizikai, geotechnikai és termelési eljárások „state-of-the-art” áttekintése és kritikai értékelése, az energiahordozók globális és hazai prognózisa közép és hosszú távon, valamint az irodalmi áttekintés alapján az alap kutatási irányok racionális kijelölése képezte.

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

Átfogó értékelések és előrejelzések készültek a 21. század globális és hazai energiaigényéről és ellátottságáról, amelynek középpontjában a fosszilis energiahordozók álltak. A konvencionális szénhidrogénekre vonatkozó előrejelzések ezen energiahordozók drasztikus felértékelődését vetítették előre és bizonyították az intenzív termelési, elsősorban kémiai technológiák széleskörű alkalmazásának szükségességét, továbbá a nem konvencionális szénhidrogének hasznosításának megkezdését, fokozását. A kutatócsoport részletesen foglalkozott a megújuló és alternatív energiaforrásoknak a globális energiaigények kielégítésében játszott szerepével, valamint áttekintette a szénfészeségek jelenlegi és jövőbeli szerepét is. A tanulmányok rávilágítottak arra a tényre, hogy a fosszilis energiahordozók még több évtizedig meghatározói maradnak az egyre növekvő energiaigények kielégítésének, és átértékelésre szorulnak a megújuló energiaforrások iránt táplált túlzott remények.

A már publikált tanulmányok és előadások nyomatékosan felhívták a figyelmet Magyarország egyre növekvő energiafüggésére és ezen belül a hazai szénhidrogénkészletek növelésére, a megkutatott vagyon jelenleginél hatékonyabb kitermelésének fontosságára. Ebben a keretben a kutatócsoport közreműködésével a kőolajtelepek kémiai művelésére alkalmas technológiát alapoztak meg elméletileg és módszert fejlesztettek ki a termelő és besajtoló kutak metastabilis kémiai rendszerekkel történő kezelésére. Ezen túlmenően a kutatócsoport közreműködésével folyik az ország legnagyobb szénhidrogén-előfordulását jelentő Makó-i

árok kutatófurásainak kőzetfizikai és hidrodinamikai vizsgálata, a földtani készlet pontosításához kapcsolódó rezervoármechanikai és fizikai kémiai kutatás.

A kutatócsoport közreműködésével eljárást dolgoztak ki a szeizmikus tomográf mérési eredményeinek zajcsökkentésére és a földfelszín közeli geológiai formációk, valamint kommunális létesítmények (archeológiai maradványok) 3D elektromágneses inverzió segítségével történő feltárására. A továbbfejlesztett inverziós módszer alkalmazhatóságát bizonyították kőzetek cementálási kitevőjének intervallum inverziós eljárással történő meghatározásával.

A kutatócsoport részvételével rehabilitációs technológia végrehajtására került sor az Óbecse (Vajdaság) melletti túlnyomásos CO<sub>2</sub> tárolóban egy négy évtizede katasztrófát szenvedett kút rehabilitására. Az közel 4 MEuro költségű, magyar tervezésű projekt sikeres végrehajtása megalapozott reményt nyújt a további készletvesztés megszüntetésére, a folyamatos CO<sub>2</sub> emisszió csökkentésére és a kút spontán kitörés elleni veszélyének elhárítására. Az nemzetközi vonatkozásban is példa nélkül álló művelet eredményessége széleskörű érdeklődést váltott ki a szakemberek és a média körében.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

Az Olajkémiai Kutatóintézettel, Orosz Tudományos Akadémiai Szibériai Szekció, Tomszk, Oroszország „Intelligens kémiai rendszerekre alapozott kőolajtermelési módszerek alap és alkalmazott kutatása” című témában az MTA-RAS együttműködés keretében.

Az Oil Chem Technologies Inc., Sugar Land, Texas, USA „A nagy hatékonyságú tenzidek és tenzidelegyek fejlesztése szénhidrogén-termelési célra” című témában.

A Pennsylvanian State University, Department of Petroleum Engineering, Norman, Pennsylvania, USA „Tárolórendszerek diagnosztikája és áramlási jelenségeinek modellezése, különös tekintettel a relatív áteresztőképesség meghatározására” című témában.

A Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar tanszékeivel a földtudomány és a bányászati tudományok területén valamennyi kutatott témakörben.

A MOL Nyrt. Upstream Divisio-val a kizozatali hatásfok növelését célzó elárasztási és rétegkezelési technológiák kidolgozása területén.

### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

„Réteggárosodást okozó vízkövek képződési mechanizmusa tömbfázisban és porózus közegben”, OTKA 47342 témában együttműködő kutatóként.

„Metastabilis mikroemulziók alkalmazására épülő rétegkezelési eljárások elméleti megalapozása”, OTKA 48715 témában témavezetőként.

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

1. Lakatos, I (editor): „Smart Fields, Smart Wells and Smart Technologies”, Progress in Oilfield Chemistry, Vol. 7., p. 321, Akadémiai Kiadó, Budapest, ISBN 978 963 05 8550 7

2. Lakatos, I, Tóth, J, Bódi, T, Lakatos-Szabó, J, Berger, P, Lee, C: Application of Surfactant Mixtures as Mobility-Control Agents, Proceedings of 14<sup>th</sup> European Symposium on Improved Oil Recovery, Cairo, Egypt, ISBN 978 90 73781 43 6
3. Lakatos, I, Lakatos-Szabó, J: Global Scenario of Conventional and Unconventional Hydrocarbons in the 21<sup>th</sup> Century, p. 59–74 in Lakatos, I. (editor): „Smart Fields, Smart Wells and Smart Technologies”, Progress in Oilfield Chemistry, Vol. 7., Akadémiai Kiadó, Budapest, ISBN 978 963 05 8550 7
4. Kovács, F: A megújuló energiafajták várható arányai az energiaigények kielégítésében, Magyar Tudomány, 168(11): 341-349
5. Kovács, F: World Energy Demands and Coal Reserves, Acta Montanistica Slovaca Rochnik, 12(3): 276–283
6. Kovács, F: Expected Rates of Renewable Energy Sources in Meeting of Energy Demands, Acta Montanistica Slovaca Rochnik, 12(4): 341–349
7. Dobróka, M, Ormos, T, Gyulai, Á: On the Reduction of Noise-Sensitivity in Seismic Tomography, 13<sup>th</sup> European Meeting of Environmental and Engineering Geophysics, Istanbul, Turkey, ISBN 978-90-73781-81-8
8. Dobróka, M, Kiss, B, Szabó, N, Tóth, J, Ormos, T: Determination of Cementation Exponent Using an Interval Inversion Method, 69<sup>th</sup> EAGE Conference & Exhibition, London, UK, ISBN 978-90-73781-54-2



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	4	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			17
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			17
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	0	SCI által regisztrált folyóiratban:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	0	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	6
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			6
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	7
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	10	posztterek száma:	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	5	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	12	Gyakorlati kurzusok száma:	7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát:	7
		PhD-t:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			1300
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			13 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## MTM PALEONTOLOGIAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Vörös Attila, az MTA levelező tagja

1083 Budapest, Ludovika tér 2.

Telefon: 210-1075, 338-3905, Fax: 338-2728

e-mail: voros@nhmus.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A 2003-ban indult kutatócsoport hosszú távú feladata alap kutatások végzése a bioszféra nagy változásainak elemzése céljából. A beszámolási év fő feladatai voltak:

- Alsó-jura Brachiopoda fauna monografikus feldolgozása.
- Triász Radiolaria vizsgálatok folytatása.
- Gyűjtés és biosztratigráfiai munka triász/jura határszelvényekben.
- Paleontológiai adatbázis összeállítása a késő pliensbachi – kora toarci időszakra.
- Ásatások az iharkúti kontinentális gerinces lelőhelyen. A begyűjtött leletek preparálása, taxonómiai besorolása.
- A vizsgálandó késő-negyedidőszaki üledékek begyűjtése. A Bukura-tó üledék-szelvényének komplex paleoökológiai feldolgozása.

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

A középső triász diverzifikációs időszak brachiopodáit az Aggtelek környéki Wettersteini-típusú zátonyhoz kapcsolódó területen vizsgálták. Az aggteleki anisusi brachiopoda fauna összetétele hasonló a Balaton-felvidékihez, de a zátony előtéri környezetben egy eddig nem ismert faj dominanciája jellemzi.

Elvégezték a balatonfelvidéki középső és felső triász szelvények radiolaria faunájának újvizsgálatával illetve az egyes lelőhelyek újragyűjtésével a késő anisusitól a kora karniig tartó időszak radiolaria alapú kvantitatív biokronológiai (UAZ) értékelését. A megvizsgált 363 faj alapján a korábbi 4 biozónát 8 zónára és 11 radiolaria szubzónára lehetett felbontani. A korábban a ladin bázisának gondolt radiolaria felvirágzás és fauna kicserélődés már a Trinodosus Zóna mélyebb részén megkezdődött. A legjobb korrelációt az ammonites biozónációval az UAZ5 Zóna uaz7 szubzónája mutatja. Ez egybeesik a Reitzites reitzi Szubzóna alsó határával. A ladin – karni határ is jól korrelál az ammonites biozónációval, ami alapján az UAZ8 Zóna uaz11 szubzónája az Aon Zóna bázisa.

A balatonfelvidéki karni (ammonoidea, bivalvia és brachiopoda) faunák diverzitásváltozásainak értelmezése során kimutatták, hogy a karni korszakban a bentonikus diverzitás ugrásszerűen megnő. A diverzitás növekedése a karnin belül nem mutat jelentős időbeli változást, hanem a Veszprémi Marga medencéjéhez keletről csatlakozó Sédvölgyi Dolomit karbonát platformjáról történő átülepítésekhez kapcsolódik, és a nagy diverzitású bentonikus fauna erre a progradációs zónára korlátozódik.

A triász végi kihálás és környezetváltozás oknyomozó kutatásában több rész kérdés vizsgálatában értek el eredményt. A Bakonyban a triász-jura határon a karbonátos platform üledékekben sem felszíni szelvényben (Kőris-hegy), sem mélyfúrásban (Zirc Zt-62, Süt-28) nem volt kimutatható a határra jellemző negatív szénizotóp anomália. Ennek oka tenger alatti erózió, amelyet a határon jelentkező mészkiválasztási krízis is kísérhetett, így a negatív anomália idején üledék nem képződött vagy nem őrződött meg. A határ megbízhatóan kimutatható mészalgák és foraminiferák alapján, de az üledékhézag mértéke pontosan nem adható meg.

A triász végén feltételezett „szuper-üvegház” felmelegedés bizonyítékát keresték a kanadai Kunga-sziget határszelvényéből származó radiolaria vázak oxigénizotóp-vizsgálatával. A kísérleti technológiájú mérések nem adtak egyértelmű eredményt, valószínűleg a kovaváz izotóp-összetételének másodlagos, diagenetikus felülíródása miatt.

A bakonyi plienschachi brachiopoda anyag monografikus leírása keretében megtörtént a Rhynchonellida rend fajleírásainak befejezése.

A jura időszak bioszféra fejlődésének időbeli keretét adó geológiai időskála kutatásának legújabb eredményeit áttekintő tanulmányban foglalták össze.

Elvégezték a jura brachiopodák díszítettségének térbeli változásainak értékelését a nyugati Tethys területén. Mind a négy vizsgált korszakban (plienschachi, bajóci, kallóvi, titon), a díszítettség mértéke északon (a 30–50° közötti zónában) a legnagyobb, azután dél felé haladva csökken, majd az egyenlítői zónában (10°–10° között) ismét növekszik. A díszítettség (és ezzel együtt valószínűleg a ragadozás mértéke) nem az egyenlítő közelében, hanem az északi (30–50° közötti) zónában a legerősebb, továbbá, a faji diverzitás is lényegesen nagyobb itt, mint az egyenlítői zónában.

A bakonyi (Iharkút) késő-kréta korú kontinentális gerinces lelőhely feldolgozásának keretében a mai krokodilok egyik legkorábbi formájának, az *Iharkutosuchus makadiinak* a cranioanatómiai és funkcionális morfológiai értelmezésére és publikálására került sor. A 2006-ban előkerült és azóta folyamatosan preparált ötödik *Hungarosaurus* csontváz alapján tisztázódtak a végtagarányokkal kapcsolatos kérdések. Az új leletek rávilágítottak, hogy a *Hungarosaurus* mellső/hátsó végtagjainak aránya megközelítőleg 1, ami azt sugallja, hogy a hazai páncélos dinoszaurusz testtartása és mozgása a többitől teljesen eltérő volt.

Magyar–Argentín TÉT pályázat keretében sor került az argentinai és magyarországi dinoszauruszok összehasonlító vizsgálatára, továbbá az Argentínából előkerült kréta pteroszaurusz anyag revíziójára. A kutatások alapján kiderült, hogy az argentinai területeken oly gyakori Abelisauridae Theropoda dinoszauruszok Európában már a santoni idején is jelen voltak, mely azt sugallja, hogy a csoport Afrikán keresztül jóval korábban érte el Európát mint azt korábban gondolták.

A Nagyalföld radiokarbon időskálával rendelkező holocén pollenszelvényeinek összefoglaló elemzése alapján elkészült egy új holocén vegetációfejlődési modell, mely 1) hangsúlyozza, hogy a Nagyalföld központi magja a holocén teljes terjedelmében erdős sztyep táj volt, 2) évezredes bontásban tárgyalja a hideg- és meleg-kontinentális erdő és sztyep társulások szekuláris szukcesszióját, 3) új kronológiai határokat határoz meg a közismert holocén vegetációtörténeti fázisokra.

A Retyezát-hegységben (Déli-Kárpátok) két glaciális gleccsertő üledékvizsgálatát végezték el, az üledék mintavételezésével és a tavi üledékszelvények multi-proxi analízisével. A paleoökológiai kutatások mellett megkezdődött a fosszilis *Abies* és *Picea* pollenek DNS vizsgálata, valamint az üledékminták előkészítése oxigén izotóp, geokémiai, növényi makrofosszília és Cladocera vizsgálatokra.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet játszanak a hazai őslénytani tudományos közéletben, mint a Magyarhoni Földtani Társulat Őslénytani-Rétegtani Szakosztályának elnöke és vezetőségi tagja. A kutatócsoport vezetője az MTA Földtudományok Osztálya elnökhelyettese, valamint a Nemzetközi Triász Rétegtani Albizottság szavazati jogú tagja. A kutatócsoport egy tagja az OTKA Földtudomány I. Zsűri tagja, hazai és nemzetközi

szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja, valamint a Nemzetközi Jura Rétegtani Albizottság szavazati jogú tagja.

A kutatócsoport tagjai az ELTE TTK geológus képzésében speciális kollégium és doktori kurzus tartásával vállalnak részt.

A kutatómunka során aktív nemzetközi együttműködés folyik amerikai és argentin kutatókkal. Egy kutató, a TÉT alapítvány támogatásával, egyhetes tanulmányutat tett Argentínában, magyar-argentin közös kutatások végzése céljából.

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

OTKA T042802: „Triász-jura határesemények oknyomozó vizsgálata”; OTKA F048341 „Magyarországi triász és jura radiolária közösségek taxonómiai és biosztratigráfiai vizsgálata, valamint alkalmazása globális paleo-oceanográfiai modellezésben”; OTKA T43325, „Mezozoós (triász, jura) faunadúsulások öskörnyezeti értelmezése hazai példákon”; TÉT magyar-argentin bilaterális együttműködés. MERG-CT-2006-041088: Marie Curie Reintegration Grant.

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

1. Galácz, A, Géczy, B, Vörös, A: Toarcian and Aalenian (Jurassic) ammonites and brachiopods from Monte Kumeta, Western Sicily. – Neues Jahrbuch für Geologie und Paläontologie, Abhandlungen 245(3): 341–352 (2007)
2. Haas, J, Demény, A, Hips, K, Zajzon, N, Weisburg, TG, Sudar, M, Pálfy, J: Biotic and environmental changes in the Permian-Triassic boundary interval recorded on a western Tethyan ramp in the Bükk Mts., Hungary. – Global and Planetary Change, 55(1-3): 136–154 (2007)
3. Hesselbo, SP Mcroberts, CA, Pálfy, J (szerk.): Triassic–Jurassic boundary events: Problems, progress, possibilities (Special Issue). – Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology, 244 (1–4). Elsevier, Amsterdam, 423 p. (2007)
4. Magyari, EK, Chapman, JC, Gaydarska, B, Marinova, E, Deli, T, Huntley, JP, Allen, JRM, Huntley, B: The 'oriental' component of the Balkan flora: evidence of expansion into south-east Europe via the Thracian Plain during the last glacial stage. – Journal of Biogeography, 35: 377–393 (2007)
5. Ósi, A, Clark, JM, Weishampel, DB: First report on a new basal eusuchian crocodyliform with multicuspated teeth from the Upper Cretaceous (Santonian) of Hungary. – Neues Jahrbuch für Geologie und Paläontologie, Abhandlungen, 243(2): 169–177 (2007)
6. Ósi, A, Főzy, I: A maniraptoran (Theropoda, Dinosauria) sacrum from the Upper Cretaceous of the Hațeg Basin (Romania) — in search of the lost pterosaurs of Baron Franz Nopcsa. Neues Jahrbuch für Geologie und Paläontologie, Abhandlungen 246(2): 173–181 (2007)
7. Pálfy, J, Mundil, R, Renne, Pr, Bernor, Rl, Kordos, L, Gasparik, M: U-Pb and  $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$  dating of the Miocene fossil track site at Ipolytarnóc (Hungary) and its implications. – Earth and Planetary Science Letters, 258: 160–174 (2007)
8. Tomas, R, Pálfy, J: Revision of Early Jurassic ammonoid types from the Perșani Mts. (East Carpathians, Romania). Neues Jahrbuch für Geologie und Paläontologie, Abhandlungen, 243(2): 231–254 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTM Paleontológiai Kutatócsoport

Átlagléttség <sup>1</sup> :	5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			28
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			28
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	12
nemzetközi együttműködés keretében:	8	SCI által regisztrált folyóiratban:	12
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	21,864	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	43
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			42
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	12
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	1	posztterek száma:	5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	1	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	3	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	1
			62
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			0 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			5
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## PE LEVEGŐKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Gelencsér András, az MTA doktora

8200 Veszprém, Egyetem. u. 10.

Telefon: (88) 624–368, Fax: (88) 624–454

E-mail: gelencs@almos.uni-pannon.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

2007-ben a kutatócsoport feladatát képezte a légköri szerves aeroszol képződésének vizsgálata, különös tekintettel a másodlagos aeroszolképződés lehetséges új mechanizmusaira; a légköri aeroszol optikai és higroszkópos tulajdonságainak tanulmányozása és regionális hatásuk becslése a látótávolságra; az aeroszol alkotók felhőképződésben betöltött szerepének tanulmányozása az emberi tevékenység a felhők tulajdonságaira gyakorolt közvetett hatásának megismerése céljából.

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

A közelmúltban végzett ködkamra kísérletekben bemutatták, hogy különböző szerves anyagok (aldehidek és alkoholok) heterogén fázisú reakcióban kénsavat is tartalmazó aeroszolrészecskéken szulfát észter képeznek. A keletkező szulfát észterek száma és mennyisége az aeroszol savasságával nőtt. Bár a kísérleteket csak néhány szerves anyaggal végezték el, a szulfát észter képződés a másodlagos szerves aeroszol egyik jelentős képződési mechanizmusa lehet. Az irodalomban azonban az erre vonatkozó mérések hiányoznak. Feltételezhető, hogy a keletkező heterogén fázisú reakciókban keletkező kéntartalmú anyagok a kontinentális finom aeroszolban mindenhol megtalálható humuszszerű anyagok csoportjába tartoznak. A szulfátészterek felületaktív tulajdonságaik következtében a felhőképződési folyamatok egyik jelentős szereplői lehetnek, bekerülhetnek a felhő-, illetve csapadékvízbe. A szennyező anyagok szulfátészterei módosíthatják az eredeti komponens biológiai felvételét ezáltal annak egészségügyi hatásait felerősíthetik. Ezeket figyelembe véve a kéntartalmú szerves alkotók (szerves szulfát észterek) vizsgálata nagy jelentőséggel bír.

A kutatócsoport tagjai nemzetközi együttműködésben a szerves szulfátok előfordulását, gyakoriságát vizsgálták különböző meteorológiai paraméterek mellett gyűjtött mintákban. Mintáik a magyarországi háttér-légszennyezettség mérő állomásról, K-pusztáról származtak különböző fotokémiai aktivitású időszakokból. A minták vizes extraktumából elválasztották a humuszszerű anyagokat, melyek molekulatömegét nagy felbontású Fourier-transzformációs tömegspektrométerrel (FT-ICR-MS) mérték. A molekulatömegből néhány kémiai szabály figyelembevételével a molekulák elemi összetételét adták meg. Méréseik alapján megállapították, hogy a nagyobb fotokémiai aktivitású időszakban az aeroszolt felépítő humuszszerű anyagok átlagos molekulatömege nagyobb volt, mint a kisebb fotokémiai intenzitású időszakban. A mintákban számos kéntartalmú anyag jelenlétét mutatták ki. A minták van Krevelen diagramjai alapján megállapították, hogy az egyes komponensek kéntartalma nagy oxigéntartalommal is párosult. A kisebb fotokémiai aktivitás mellett gyűjtött mintákban az irodalomban már bemutatott alfa-pinén nitrogén tartalmú szulfát észter származékát ( $C_{10}H_{17}NO_7S$ ) is megtalálták. A mintákban néhány kiindulási szerves anyag és azok szulfát észter származékai együtt fordultak elő, a kéntartalmú anyagok az összes

komponens 33%-át alkották. A szulfátészterek képződésére vonatkozóan feltételezték, hogy a fotokémiai úton gázfázisban képződő karbonilvegyületek kondenzációját az ugyancsak gázfázisban képződő kénsav kondenzációja követi, melynek révén az aeroszolrészecskék felületén szulfátészter képződés megy végbe. A folyamat egyben a másodlagos szerves aeroszolképződés egyik lehetséges új mechanizmusa is. A heterogén fázisban keletkező nagyszámú kéntartalmú komponens befolyásolhatja az aeroszol felhőképződésben betöltött szerepét.

Európai Unió kutatási projekt keretein belül tanulmányozták mono- és szeszkviterpének oxidációjának termékeit. A kamrakísérleteket különböző paraméterek (ózon koncentráció, páratartalom, napsugárzás intenzitása, öregítés) mellett végezték, a műszeres analitikai vizsgálatokhoz gázkromatográfhoz illetve folyadékkromatográfhoz kapcsolt tömegspektrométert alkalmaztak. Megállapították, hogy a kísérletek során alkalmazott paraméterek mellett a termékek igen hasonlóak, csak az egyes vegyületek arányában tapasztalható eltérés.

Az utóbbi évtizedekben a légkör optikai tulajdonságait meghatározó aeroszol fizikai és kémiai tulajdonságait az emberi tevékenység jelentősen módosítja. A sugárzás-átvitel az optikai tulajdonságok függvénye, az ember a légszennyező anyagok kibocsátásával az éghajlatot és a látótávolságot is befolyásolja. A részecskék optikai tulajdonságainak tanulmányozása során megbecsülték az aeroszol szórási és elnyelési együtthatóját. Megállapították, hogy mind a szórási, mind az elnyelési együttható számított értékei összevethetők a mért adatokkal. 23 magyarországi meteorológiai állomáson 1996 és 2002 között mért látótávolság adatok elemzését végezték el. A látótávolságban (extinkciós együtthatóban) 1996 és 2002 között bekövetkezett változásokat vizsgálva megállapították, hogy Magyarországon az 1996 és 2002 közötti időszakban évente átlagosan 0,7 km-rel nőtt a látótávolság, amely az aeroszol részecskék koncentrációjának – következésképp extinkciójának – csökkenését jelzi. Ez az eredmény összhangban van a vizsgált időszakban bekövetkezett magyarországi kén-dioxid kibocsátás csökkenésével.

A légköri aeroszol egyik legfontosabb tulajdonsága, hogy kémiai összetétele folytán, 100%-nál kisebb relatív nedvességtartalmú környezeti körülmények között is adszorbeálja a vízgőzt, amelyet a részecskék higroszkópos tulajdonságának nevezünk. A kémiai összetétel mellett, a részecskék vízgőz adszorpciója számos fizikai folyamatot befolyásol (pl. a részecskék éghajlatra gyakorolt hatását, felhőfolyamatokban a részecskék aktiválódását). Az eredmények szerint a szerves vegyületek nagymértékben befolyásolják a részecskék vízfelvételét. Emiatt különböző légszennyezettésgű helyeken, pl. városi és vidéki levegőben az aeroszol részecskék higroszkópos tulajdonsága jelentősen eltér. Kimutatták, hogy a vízgőz adszorpciója miatt 86%-os relatív nedvességen száraz levegőhöz képest vidéki levegőben átlagosan 31%-kal, míg városi levegőben csupán 9%-kal növekedett a részecskék tömege.

A szerves vegyületek felhőképződésben betöltött szerepének tanulmányozásához tenziometriás és ozmometriás vizsgálatokat végeztek szerves vegyületek és szervesetlen sók vizes oldataiban. A mérési eredmények és a Köhler modell felhasználásával kiszámították, hogy egy adott száraz átmérőjű és összetételű részecske milyen túltelítettség mellett fog aktiválódni. Ezeket a számított eredményeket összehasonlították a nemzetközi együttműködésben kísérletileg meghatározott értékekkel. Megállapították, hogy bizonyos körülmények között a szerves és szervesetlen alkotók együttes hatására a felhőcseppek

képződése könnyebben végbemegy, mint tiszta szervesetlen komponensek esetében. Más esetekben a felhőcseppek aktiválódása hasonló kritikus túltelítettségen következik be, azonban a szerves komponensek jelentősen megnövelik a potenciális kondenzációs magvak számát, illetve tömegét. Ezen eredmények azt mutatják, hogy a légköri aeroszol éghajlatra gyakorolt hatásának (felhőképződés, csapadékképződés, energiamérleg) modellezésénél a szerves komponenseket is figyelembe kell venni.

A kutatások finanszírozása gyakorlatilag teljes mértékben pályázati forrásokból történt, a kutatásokban a kutatócsoport tagjain kívül PhD hallgatók és témán foglalkoztatott további munkatársak is részt vettek.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

–

#### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

Részvevői az FP6 IP- 036833-2 „European Integrated project on Aerosol Cloud Climate and Air Quality interactions” pályázatnak, amelynek keretében aeroszolkémiai mérések, valamint az FP6 RII3-026140 „European Super-sites for Atmospheric Aerosol Research” pályázatnak, ahol az aeroszol mintavételi és mérési infrastruktúra fejlesztése a feladatuk. Az EU-6 „OOMPH” projekt keretében az óceánok fölött a szerves aeroszolrészecskék eredetét vizsgálták. Az OTKA TS049845 pályázat keretében a beszámolóban ismertetett fő kutatási tevékenységüket végezték. A 2007-évben elnyerték „A környezeti levegő aeroszol-szennyezettségére vonatkozó új EU szabályozás betartását elősegítő műszerek és mérési eljárások fejlesztése” című Jedlik Ányos pályázatot.

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

1. Gelencsér, A, May, B, Simpson, D, Sánchez-Ochoa, A, Kasper-Giebl, A, Puxbaum, H, Caseiro, A, Pio, C, Legrand, M: Source apportionment of PM<sub>2.5</sub> organic aerosol over Europe: primary/ secondary, natural/ anthropogenic, fossil/biogenic origin, J. Geophys. Res. 2007, 112, doi:10.1029/2006JD008094
2. Lukács, H, Gelencsér, A, Hammer, S, Puxbaum H, Pio, C, Legrand, M, Kasper-Giebl, A, Handler, M, Limbeck, A, Simpson, D, Preunkert, S: Seasonal trends and possible sources of brown carbon based on two-year aerosol measurements at six sites in Europe, J. Geophys. Res. 2007, 112, doi:10.1029/2006JD008151
3. Varga, Z, Kiss G, Hansson, H-C: Modelling the cloud condensation nucleus activity of organic acids on the basis of surface tension and osmolality measurements, Atmos. Chem. Phys. 7, 4601–4611 (2007)
4. Yttri, KE, Dye, C, Kiss G: Ambient aerosol concentrations of sugars and sugar-alcohols at four different sites in Norway, Atmos. Chem. Phys. 7, 4267–4279 (2007)



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: PE Levegőkémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	4	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			0
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	16
nemzetközi együttműködés keretében:	16	SCI által regisztrált folyóiratban:	16
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	46,827	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	377
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			305
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	22	posztterek száma:	6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	13	Gyakorlati kurzusok száma:	8
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	3
			390
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			23 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	72 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	24 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			4
EU forrásból:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	38 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## PPKE-SE NEUROBIOLÓGIAI ÉS INFOBIONIKAI PLASZTICITÁS KUTATÓCSOPORT

Vezető: Roska Tamás, az MTA rendes tagja  
1083 Budapest, Práter u. 50/a.  
Telefon: 886-4703, Fax: 886-4724  
e-mail: roska@sztaki.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Hogyan kapunk el egy felénk repülő labdát? Hogyan vesszük észre az ismerősünket a vasútállomáson várakozó tömegben? Kutatócsoportunk munkájának célja ilyen egyszerűnek tűnő, mégis mesterséges rendszerekben eddig nem megvalósított feladatok háttérét képező idegrendszeri folyamatok jellemzése, kvantitatív modellezése és ezen modellek implementációja robotvezérlési algoritmusokban. Kiemelt hangsúlyt kap a környezethez alkalmazkodni képes, plasztikus érzékelő és motoros funkciók idegrendszeri mechanizmusainak kutatása és ezek kvantitatív, neuromorf modellezése. A neurobiológiai kutatások állatmodelleken valamint a legújabb funkcionális agyi képalkotó módszerek segítségével embereken történnek. Kutatócsoportunk sajátos területe az infobionika és a neurobiológiai plaszticitás. Különösen nehéz feladatnak tűnik a részlegesen megismerhető, de kvantitatív funkcionális modellekkel is jellemezhető olyan neurobiológiai eredmények elérése és interpretálása, amely a különböző érzékelő-robotikai feladatokban használhatók. Kutatásaink a következő témacsoportok köré szerveződnek:

- Mozgásmintázatok dinamikus modellezése és implementációja robotokon: az EEv2 bipedál robot.
- A mozgáskoordináció idegrendszeri folyamatai.
- A hippokampusz funkcionális modellje.
- Szenzoros kérgi funkciók szerveződése.
- A látás és vizuális figyelem idegrendszeri folyamatai és plaszticitása.

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

*Mozgásmintázatok dinamikus modellezése és implementációja robotokon: a EEv2 bipedál robot*

Egy olyan rendszert készítettünk, ahol az emberi mozgás vizuális visszacsatolás mellett segíti a gépi járás vizsgálatát. Robottalpra szerelt 3D tapintás szenzorokkal kiegészítve kísérleti eszközünkkel modellezhető lehet a látás-tapintás-mozgás kapcsolatok néhány aspektusa.

A robot megalkotásánál az emberi alsó végtag mozgási szabadságait és a rendelkezésre álló technikai lehetőségeket vettük figyelembe. A robot vezérlését minden egyes szegmensnél egy dedikált vezérlő és meghajtó áramkör végzi. Lehetőség van a robot csuklópontjaiban elhelyezett szögmérők állapotainak lekérdezésére, ezek segítségével valós időben lehet nyomon követni a robot mozgását (~20 lekérdezés másodpercenként). A robot irányítása szögállapotok elküldésével (~20 parancs másodpercenként) történik. Első kísérletként a keretprogram segítségével előre felvett pozíciók felvételével majd ezek visszajátszásával sikerült statikusan stabil járást megvalósítani. Ezután inercia szenzorok segítségével felállítottunk egy emberi mozgáskövető rendszert, amely képes az alsó végtag valósidejű monitorozására. Ezzel elértük, hogy valós kapcsolat épüljön ki a mozgáskövető rendszert használó ember és a robot között.

*A mozgáskoordináció idegrendszeri folyamatai*

A mozgáselemzés, specifikus motoros programok modellezése témakörben folyó kutatások keretében vizsgáltuk a szem- és a fej/nyak/törzs mozgás közötti összefüggéseket, ún.

„saccadic” (gyors, ugráló szemmozgás) és „smooth pursuit” (lassú követő szemmozgás) során. Nem korlátozott fej/nyak/törzs mozgás során a célinger követő szemmozgásokhoz elsősorban a fej mozgatása, de kisebb mértékben a törzs mozgatása is hozzájárul. A saccadikus szemmozgás esetén a törzs mozgása körülbelül 100 ms-mal megelőzte a fejmozgást.

#### *A hippocampusz funkcionális modellje*

Sikerült kidolgozni a CA1 régió piramissejtjeinek új, az eddigieknél pontosabb biofizikai modelljét nemlineáris optimalizáció (genetikus algoritmus) és fázistér-analízis segítségével. Szisztematikusan egyszerűsített idegsejtmodellekből felépített hippocampális hálózatok számítógépes szimulációjával vizsgáltuk a lokális mechanizmusok és a kívülről érkező ritmikus bemenetek kölcsönhatását a funkcionális szempontból alapvető fontosságú téta és gamma frekvenciás oszcillációk létrejöttében. Sikerült megmutatni, hogy az egyes idegsejtek belső tulajdonságai, a hálózati kölcsönhatások, valamint a külső bemenetek jellemzői hogyan befolyásolják a létrejövő oszcilláció típusát. A hippocampális neurális dinamika feltérképezése hozzájárulhat az időskori memóriazavarok, illetve az epilepsziás rohamok kialakulásának jobb megértéséhez és hatékonyabb kezeléséhez.

#### *Szenzoros kérgi funkciók szerveződése*

*Elemi tapintási feldolgozó modulok kapcsolatai a szomatoszenzoros kéregben:* A kísérletek 2007 őszén indultak, az adatgyűjtés és kiértékelés folyamatban van. A funkcionálisan azonosított modulok idegi kapcsolatainak fiziológiai módszerekkel készített funkcionális kérgi térképekre történő vetítésével kívánjuk megérteni, hogyan alakulnak ki az elemi, bőrreceptorok által közvetített tapintási ingerekből összetett érzetek az elsődleges szomatoszenzoros kéreg szintjén.

*A vizuo-taktilis kérgi hálózat vizsgálata:* Kimutattuk, hogy a vizuo-taktilis integrációban, ill. általában a magas szintű kérgi integrációban kulcsszerepet játszó áréak ún. információs szűk keresztmetszet képeznek. Eredményeink elősegítik az áréak kapcsolatrendszeré által kialakított bonyolult hálózatban megvalósuló multimodális (pl. látás és tapintás) integráció agykérgi folyamatainak megértését.

#### *A látás és vizuális figyelem idegrendszeri folyamatai és plaszticitása*

A kutatások célja a hatékony információkinyerést biztosító, a specifikus ingerkörnyezethez és az aktuális feladathoz alkalmazkodni képes, adaptív látási folyamatok perceptuális és neurális mechanizmusainak jellemzése és modellezése, különös tekintettel a lényegtelen, zavaró szenzoros információ kiszűrésének figyelmi mechanizmusaira és azok plaszticitására. Kutatásaink során pszichofizikai, funkcionális mágneses rezonancia képalkotás (fMRI) és eseményhez kötött potenciálok (EKP) módszereket alkalmaztunk.

*A lényegtelen vizuális információ figyelmi kiszűrése:* Azonosítottuk és jellemeztük az irreleváns vizuális mozgásinformáció kiszűréséért felelős neurális hálózatot. Továbbá kimutattuk, hogy gyakorlással fokozható a lényegtelen vizuális ingerek kiszűrésének hatékonysága, aminek hátterét ezen folyamatosan zajként megjelenő vizuális ingerekre kialakuló perceptuális és neurális érzékenység-csökkenés képezi.

*A figyelmi szelekció hatékonyságának vizsgálata skizofrén és tompalátó betegekben:* Kimutattuk, hogy a skizofrén és a tompalátó betegek egyaránt rosszabbul teljesítenek a figyelmi tárgy-követési feladatokban, mint a kontroll alanyoknak.

*A figyelmi szelekció modell:* Kidolgoztuk az ingertulajdonságokon alapuló figyelmi szelekció, a „bottom-up” vagy automatikus figyelem egy dinamikus modelljét. A modellt természetes környezetről készült, dinamikus videókon teszteltük és igazoltuk, hogy a modellünk által generált figyelmi térképek, fixációs mintázatokat nagyon hasonlóak az emberi fixációs mintázatokhoz, amiket ugyanazon videók megfigyelése alatt regisztráltunk.

Eredményeink lehetséges klinikai és mérnöki alkalmazási területei: 1) Alapját képezhetik új, a specifikus figyelmi funkciók zavarainak korai és megbízható detektálására valamint azok kezelésére alkalmas terápiás eljárások kidolgozásának; 2) Algoritmikus implementációjuk hozzájárulhat zajos környezetben is hatékony, ingerkörnyezetekhez adaptálódni képes mesterséges látórendszerek tervezéséhez.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

*Hazai kapcsolatok:* A kutatócsoport a PPKE Információs Technológiai Karán és a Semmelweis Egyetemen működik és a lokális együttműködések mellett az MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézetének több csoportjával is kollaborál. A kutatócsoport további együttműködő partnerei a BME Kognitív Tudományi Tanszéke és Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszéke, valamint az MTA Rézecske és Magfizikai Kutatóintézet, Biofizikai részlege.

*Nemzetközi kapcsolatok:* Kutatócsoportunk tagja két, a European Science Foundation által támogatott nemzetközi kutatási hálózatnak: 1) European Research Network for Investigating Human Sensorimotor Function in Health and Disease (ERNI-HSF). 2007-2011, Steering Committee Member: Vidnyánszky Zoltán; 2) COST BM0605, Consciousness: A transdisciplinary, integrated approach. 2007–2011, Management Committee Member: Vidnyánszky Zoltán. *További együttműködések:* Anna Wang Roe, Vanderbilt Univ. USA; John Serences, Dept. of Cog. Sci., UC Irvine, USA; David Melcher, CMBS, Univ. Trento, Italy

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

FIRCA (Fogarty International Collaboration Award) (2007–2010) Perceptual circuits in somatosensory cortices.; OTKA T48949 (2005–2008) A vizuális figyelmi szelekció plaszticitása.; OTKA T049517 (2005–2008), Különböző típusú GABAerg interneuronok szerepe a hippocampális gamma oszcillációkban; OTKA K60927 (2006–2009), A hippocampális theta aktivitás strukturális alapja és szubkortikális modulációja; Magyar-Olasz Kormányközi Együttműködés 2008–2010 pályázat keretében „Sokszenzoros, bioinspirált robotirányítás celluláris érzékelő hullámszámítási technológiával”.

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

1. Roska T.: „Cellular Wave computers for nano-tera-scale technology – beyond Boolean, spatial-temporal logic in million processor devices”, *Electronics Letters*, Vol.43, No. 8. pp. 427–429 (2007)
2. Roska T.: „Circuits, Computers, and beyond Boolean Logic”, *International Journal of Circuit Theory and Applications*, Vol. 35, pp. 485–496 (2007)
3. Mozsary A, Chung JF, Roska T.: „Function-in-layout: A demonstration with bio-inspired hyperacuity chip”, *International Journal of Circuit Theory and Applications*, Vol. 35, pp. 149–164 (2007)
4. Vásárhelyi G., Fodor B., Roska T.: „Tactile sensing-processing: Interface-cover geometry and the inverse-elastic problem”, *Sensors and Actuators A: Physical*, Vol. 140, Issue 1, pp. 8–18 (2007)
5. Acsády L, Káli S.: Models, structure, function: the transformation of cortical signals in the dentate gyrus. *Prog. Brain Res.* 163: 577–99 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: PPKE-SE Neurobiológiai és Infobionikai Plaszticitás Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	8	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	2
			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			15
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			15
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	12
nemzetközi együttműködés keretében:	0	SCI által regisztrált folyóiratban:	12
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	18,967	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	222
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			197
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	3	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	6	posztterek száma:	4
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	15	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	0	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	0	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	12	Diplomamunkát:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	4
			198
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			37 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	49,4 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	35 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			17,5 MFt

## SZTE ANALÍZIS ÉS SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Vezető: Totik Vilmos, az MTA rendes tagja  
6725 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.  
Telefon: (62) 544-089, Fax: (62) 544-548  
e-mail: totik@math.u-szeged.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Kutatások végzése az alábbi területeken:

- Harmonikus és Fourier-analízis, potenciálmélet (változó súlyú approximáció problémájának teljes feloldása külső potenciáltérben vett egyensúlyi mérték simaságával és a megfelelő harmonikus mértékek és konjugált függvények finom becsléseivel). Minimális polinomok előírt zérushelyekkel.
- Fourier-módszer a határeloszlás-elméletben. A kupongyűjtő probléma. Aszimptotikus sorfejtések a kupongyűjtő problémára. Szentpétervári játékok.
- Funkcionál- differenciálegyenletek kvalitatív vizsgálata nem-monoton visszacsatolással, globális dinamika. Influenza-pándémia modellje késleltetett hatással. Másodrendű egyenletek.
- Gráfelmélet: páros gráfok, gráfok színezése.

Az SZTE Bolyai Intézetében folyó oktatás segítése előadások és szemináriumok tartásán, ill. tehetséggondozó szeminárium szervezésén keresztül. A kutatócsoport aktív szerepet játszott a 2007. évi Schweitzer Miklós Matematikai Emlékverseny megszervezésében és lebonyolításában.

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

A kutatócsoport az alábbi témákban ért el eredményeket (résztevő kutatók száma / ebből a kutatócsoport tagja) [referencia]:

*Folytonos közelítés* (2/2)[1] Legyen  $w$  egy az  $[a,b]$  intervallumon értelmezett pozitív függvény. A kérdés, hogy milyen  $f$  folytonos függvények közelíthetők egyenletesen  $w^n P_n$  alakú függvényekkel, ahol  $P_n$  egy  $n$ -edfokú polinom. A szerzők szükséges és elegendő feltételt adnak arra, hogy mikor kapható meg tetszőleges folytonos függvény határértékként. Ez az eredmény minden korábbi idevágó tételt magában foglal, és több nyitott problémát megold. [1] Totik, V. and Varjú, P.P., Smooth equilibrium measures and approximation, *Advances in Math.* 212 (2007), no. 2, 571–616.

*Minimális polinomok előírt zérushelyekkel.* (2/2)[2] Legyenek  $Z_1, \dots, Z_k$  tetszőleges pontok a komplex egységkörvonalon. Halász G. konstruált olyan  $n (> 2k)$  fokú  $P$  polinomot, aminek a zérushelyei között szerepelnek a  $Z_1, \dots, Z_k$  pontok, és  $|P(z)| \leq \exp(4k^2/n)$ , ha  $|z|=1$ . A dolgozat megmutatja, hogy ez a korlát jelentősen javítható, feltéve, hogy a  $Z_1, \dots, Z_k$  pontok  $\alpha 2\pi/n$  szeparáltak valamely  $\alpha > 1$  konstanssal. Konkrétan olyan polinom létezése igazolható, amire  $|P(z)| \leq 1 + D_\alpha \sqrt{k/n}$  valamely  $D_\alpha$  csak  $\alpha$ -tól függő konstanssal. Továbbá, ha csak valamely  $\alpha < 1$  konstanssal tesszük fel a szeparáltsági feltevést, akkor a Halász-féle korlát jelentősen nem javítható. Emellett a dolgozat igazolja, hogy sok zérushely az egységkörön maga után vonja, hogy a polinom normája nagy. [2] Totik, V. and Varjú, P.P., Polynomials with prescribed zeros and small norm, *Acta Sci. Math. (Szeged)* 73(3-4), 2007, 593–612.

*Kupongyűjtő probléma* (1/1)[3] Adva van  $n$  különböző kupon, melyekből egy kupongyűjtő véletlenszerűen visszatevéses mintát vesz. Adott  $n$ -től függő  $m_n$  szám esetén a mintavételt addig folytatja, amíg előszörre pontosan  $n - m_n$  különböző kupont nem gyűjtött. A szerző megmutatja, hogy a szükséges húzások véletlen számának standardizáltja aszimptotikusan

normális eloszlású, ha  $m_n \rightarrow \infty$  és  $(n-m_n)/\sqrt{n} \rightarrow \infty$  amint  $n \rightarrow \infty$ . Fourier-analízisbeli eszközökkel felső korlátot ad a konvergencia sebességére ezen határeloszlás tételekben. [3] Pósfai, A., Rates of convergence for normal approximation in incomplete coupon collection, *Acta Sci. Math. (Szeged)* 2007, 73(1-2), pp 333–348.

*Általánosított szentpétervári probléma* (1/1)[4] Egy általánosított, több játékos szentpétervári játékban meghatározásra kerülnek azok az együttműködési stratégiák, amelyek minden játékos számára extra hozamot eredményeznek. Ilyen stratégiák létezésére szükséges és elégséges feltételt ad a dolgozat. Megmutatja, hogy a hozam Lebesgue értelemben is mindig létezik annak ellenére, hogy a klasszikus  $p=1/2$  esettől eltérően az eredeti saját nyeremények és a megengedett stratégiával kapott összegek sztochasztikusan csak két játékos esetén hasonlíthatók össze. Legalább három játékos esetén pedig megmutatja, hogy a sztochasztikus összehasonlítás általában nem lehetséges. [4] Kevei P., Generalized n-Paul paradox, *Statistics & Probability Letters* 77(11), 2007, 1043–1049.

*Globális dinamika nem-monoton késleltetett visszacsatolásra* (2/1)[5,6] Az [5] dolgozat a  $x'(t) = -\mu x(t) + f(x(t-\tau))$  alakú, unimodális késleltetett visszacsatolásos funkcionál-differenciálegyenlet által generált végtelen dimenziós dinamikai rendszert tárgyalja. Megállapítja a globális attraktor létezését, erre korlátokat ad. Attraktív invariáns intervallumokat talál a folytonos függvények terében és feltételeket ad arra, hogy minden megoldás véglegesen belép abba a tartományba, ahol  $f'$  negatív, így a monoton visszacsatolásra ismert eredmények alkalmazhatóak az aszimptotikus viselkedés leírására. Speciálisan heteroklinikus pályák konstruálhatók a triviális egyensúlyi helyzet és a pozitív egyensúly, vagy egy e körül oszcilláló periodikus pálya között. Az eredményeket numerikus példák illusztrálják a híres Nicholson-egyenlet és a Mackey–Glass egyenlet esetében. Egy hasonlóan nem-monoton,  $p'(t) = \beta p^m(t-\tau)/(1+p^n(t-\tau)) - \gamma p(t)$  egyenletet tárgyal [6]. Ez az egyenlet a hematopoiesis (vérsejtképződés) modelljének lett kitzúve. A dolgozat kijavít több hibás eredményt az irodalomban; és megmutatja, hogy a nulla egyensúlyi helyzet a fázistér egy nagy részalmozgását vonzza. [5] Röst, G. and Wu, J., Domain-decomposition method for the global dynamics of delay differential equations with unimodal feedback, *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A Math.*, 2007, Vol 463(2086), pp. 2655–2669. [6] Röst, G., On the Global Attractivity Controversy for a Delay Model of Hematopoiesis, *Appl. Math. Comput.* 2007, Vol 190/1 pp 846–850.

*Gyógyszerrezisztencia terjedésének modellje influenza-pándémia esetén* (6/1)[7] Egy esetleges influenza-pándémia esetén az antivirális szerek komoly szerepet kapnak, mivel a vakcina kifejesztése időt vesz igénybe. Sajnos az ilyen szerekkel szemben könnyen rezisztencia alakulhat ki. Ez a munka egy olyan új funkcionál-differenciálegyenletes kompartmentmodellt mutat be, amelyből meghatározható a rezisztens törzs kialakulása és elterjedésének mértéke különböző antivirális stratégiák mellett. Az eredmények megmutatják, hogy a terápia gyors elkezdése kritikus lehet, és figyelembe véve a 0.5-1 napos tipikus késlekedést, egy antivirális stratégia önmagában elégtelen, ha a vírustörzs reprodukciós száma meghaladja 1.4-et. Önfenntartó, rezisztens törzs okozta járvány lehetősége is fennáll, ha a relatív fitnessz eléri 0.4-et. [7] Alexander, M. E., Bowman, C.S., Feng, Z., Gardam, M., Moghadas, S. M., Röst, G., Wu, J., and Yan, P., Emergence of drug-resistance: implications for antiviral control of influenza pandemics, *Proc. R. Soc. Lond. Ser. B Biol. Sci.* 2007, Vol 274, Nr 1619, pp 1675–1684.

*Páros gráfok* (1/1)[8,9] A szerző bebizonyítja a Bollobás-Eldridge sejtés egy erősebb változatát páros, korlátos fokszámú gráfokra, elegendően nagy csúcshatár esetén. Ez az első ilyen típusú eredmény tetsszöleges (de korlátos) fokú expander gráfokra. Egyszerű páros

gráfok egy osztályára megmutatja reguláris feszítő részgráf létezését. [8] Csaba, B., On the Bollobas-Eldridge conjecture for bipartite graphs, *Combinatorics, Probability and Computing*, 2007,16, pp 661–691. [9] Csaba, B., *Regular spanning subgraphs of bipartite graphs of high minimum degree*, *Electronic Journal of Combinatorics*,14 (2007), #N21

*Gráfok négyzetmentes színezése (2/1)*[10] A dolgozat fő eredménye, hogy ha egy gráf  $k$ -fa, akkor van olyan színezés, ami legfeljebb  $O(c^k)$  színt használ, ha  $c > 6$  úgy, hogy a színek négyzetmentes sorozatot alkotnak tetszőleges sétán. Továbbá, az outerplanar gráfok esetében 12 szín mindig elegendő. [10] Barát, J. and Varjú, P.P., On square-free vertex colorings of graphs, *Studia Sci. Math. Hungar.* 2007, 44(3), pp 411–422.

*Másodrendű differenciálegyenletek (4/1)*[11,12,13] Kis megoldások létezése lett bizonyítva másodrendű differenciálegyenletek egy osztályára. Kaotikus viselkedést sikerült igazolni periodikusan gerjesztett ingára. [11] Hatvani, L., The growth condition guaranteeing small solutions for a linear oscillator with an increasing elasticity coefficient, *Georgian Mathematical Journal*, 2007, 14(2), 269–278. [12] Bánhelyi, B., Csendes, T., Garay, B., Hatvani, L. Computer Assisted Proof of Chaotic Behaviour of the Forced Damped Pendulum, *Folia FNS Univ. Mas. Brun.*, 16(2007), 9–20. [13] Csendes, T., Bánhelyi, B., Hatvani, L. Towards a computer-assisted proof for chaos in a forced damped pendulum equation, *J. Comput. Appl. Math.* 105(2007), 378–383

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport tagjai *előadásokat tartottak* többek között az alábbi konferenciákon és szemináriumokon: Csörgő Sándor 60. születésnapja tiszteletére rendezte nemzetközi konferencia (Szeged); Canadian Applied and Industrial Mathematics Society 2007 (Banff, Alberta, Kanada); 8th Colloquium on the Qualitative Theory of Differential Equations (Szeged); Equadiff 07 (Bécs, Ausztria); CRM-AARMS Workshop on Delay Differential Equations (Halifax, Nova Scotia, Kanada); Modern Approaches in Asymptotics of Polynomials (Banff Int. Research Station, Banff, Kanada); University of South Florida (Tampa, USA) szeminárium; SZTE Bolyai Intézet szemináriumai (Sztochasztika, Differenciálegyenletek). *Konferenciaszervezés:* 8th Colloquium on the Qualitative Theory of Differential Equations (Szeged); 5th European Congress of Mathematics (Amsterdam, Hollandia); 9th International Conference on Approximation and Optimization in the Caribbeans (Sand Andres, Kolumbia). *Együttműködés* kanadai (4), USA-beli (1) és olasz (1) kutatókkal.

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport külön nem pályázott más támogatásra. Futó OTKA pályázatokban részt vesznek kutatócsoporti tagok.

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

*Globális dinamika nem-monoton késleltetett visszacsatolásra (2/1)*[5,6]: Röst, G. and Wu, J, Domain-decomposition method for the global dynamics of delay differential equations with unimodal feedback, *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A Math.*, Vol 463(2086), pp. 2655–2669 (2007)

*Általánosított szentpétervári probléma:* Kevei P, Generalized n-Paul paradox, *Statistics and Probability Letters* 77(11), 1043–1049 (2007)

*Folytonos közelítés:* Totik, V. and Varjú, PP, Smooth equilibrium measures and approximation, *Advances in Math.* 212, no. 2, 571–616 (2007)



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport

Átlagléttség <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			13
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			13
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	9
nemzetközi együttműködés keretében:	0	SCI által regisztrált folyóiratban:	9
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	0	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			0
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	12	posztterek száma:	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	21
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	4	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	11	Gyakorlati kurzusok száma:	11
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	3
			40
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			12 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	6,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## SZTE LÉZERFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Bor Zsolt, az MTA rendes tagja  
6720 Szeged, Dóm tér 9.  
Telefon: (62) 544–273, Fax: (62) 544–658  
e-mail: bor@physx.u-szeged.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Nemzetközi szintű kutatómunka végzése a femtoszekundumos optika, az ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése, és a lézerek spektroszkópiai és anyagtudományi alkalmazásai területén.

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

*Ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése.* Befejezéshez közeli szakaszba érkezett a terawatt csúcsteljesítményű femtoszekundumos titán-zafír lézerrendszer építése, amely hazai viszonylatban egyedülálló lehetőségeket nyit az elkövetkező években az anyagtudományi és biofizikai kutatásokban, ultrarövid időskálán lejátszódó jelenségek vizsgálatában. Emellett alapkutatásokat végeztek femtoszekundumos impulzusok diszperziójának témakörében, megmérték levegő nyomásfüggő diszperzióját. Továbbá egy hőmérséklettel hangolható megoldást dolgoztak ki lézerrendszerek diszperziójának kompenzálására.

*Lézerek biológiai és anyagtudományi alkalmazásai.* Nano és femtoszekundumos lézerimpulzusokkal polimerek és üvegszerű szén felszínén keltettek plazmát, melyből amorf gyémántszerű és hidrogénezett szén-rétegeket alakítottak ki. A rétegeket ionsugaras analitikával és spektroszkópiai ellipszometriával minősítették. A kialakuló rétegek sűrűségének és összetételének szemszögéből értelmezték a lézerfény elnyelésének szerepét. Továbbá reaktív impulzus lézeres vékonyréteg építéssel üvegszerű szén céltárgyon keltett plazmából metán és hidrogén háttérgázban gyémántszerű és hidrogénezett szén-rétegeket állítottak elő. Elemezték a reaktív háttérgáz minőségének és nyomásának szerepét a kialakuló kötőanyag szerkezet szempontjából, melyeket Raman-spektroszkópiával és spektroszkópiai ellipszometriával határoztak meg. Lézeres vékonyréteg építéssel félvezető (Si, SiC, GaAs és InP) rétegeket készítettek. A rétegek összetételét ionsugaras analitikával és elektronsugaras röntgen mikroanalízissel, vastagságát és optikai tulajdonságait spektroszkópiai ellipszometriával határozták meg. Megállapították, hogy az összetétel változásával a rétegek fizikai tulajdonságai követik a megfelelő kristályos módosulatok tulajdonságait, illetve meghatározták sztöchiometrikus vegyület-félvezető rétegek előállításához szükséges körülményeket.

Kísérleti berendezést építettek, mely lehetővé teszi félvezető alapú, elektromos nanostruktúrált gáz szenzorok ellenállás-fluktuáció spektroszkópián alapuló tesztelését. Az első mérés-sorozatok alapján kimutatták, hogy funkcionizált szén nanocső alapú szenzorok ellenállás-fluktuációinak teljesítmény sűrűség spektruma, alakfelismerő programok alkalmazásával, alkalmas  $N_2O$ , CO,  $H_2S$  és  $H_2O$  gázok megkülönböztetésére a ppm koncentráció tartományban. Lézeres eljárással wolfram, wolfram-oxid valamint vas/szén tartalmú nanorészecskéket és porózus nanorészecske filmeket állítottak elő.

Protonnyalábos mikro-megmunkálással PMMA mintákban törésmutató változást hoztak létre, a változás mértékét spektroszkópiai ellipszometriával vizsgálták. A törésmutatóban igen

kicsíny,  $10^{-2}$ -es nagyságrendű növekedést mutattak ki. Megállapították, hogy a törésmutató profil a protonok energia veszteségi görbéjének megfelelően változik.

Optoelektronikai anyagok és szilícium szeletek minősítésére fotolumineszcencia elvén alapuló érintés- és roncsolásmentes mérési módszereket dolgoztak ki. Speciális optikai megoldásokkal lehetővé tették, hogy a különböző félvezetők fotolumineszcencia spektrumait megfelelő jel-zaj viszony mellett lehessen mérni. A kifejlesztett eszközök perspektivikus piaci lehetőségeket jelentenek az együttműködő ipari partner, a Semilab Zrt. számára.

A korábbi vizsgálatok kimutatták, hogy az impulzuslézeres párologtatás (ILP) elvén működő rétegépítés során, ns-os excimer lézer impulzusok alkalmasak biológiai sztöchiometrikus vékonyrétegek (fehérjék, enzimek stb.) előállítására. A módszer hatékonyságát növelvén a ns-os impulzusokat, melyeknek termális hatása komoly, ultrarövid (fs-os) impulzusokkal helyettesítették. A kísérleteket egy 450 fs impulzushosszúságú KrF excimer lézerrel végezték pepszin, fogpor, biopolimer stb. mintákon. A spektroszkópiai vizsgálatok bebizonyították, hogy sérülékeny szerves és bio molekulákból is lehet bioaktivitást tartó vékonyrétegeket leválasztani fs-os impulzuslézeres párologtatással. Továbbá ns-os ILP-vel elektromosan szigetelő, de porózus szerkezetű Teflon vékonyrétegeket választottak le szén-nanocső rétegekre, melyeket a későbbiekben szenzorikai célokra kívánnak használni.

A kutatócsoport a korábbiakban kimutatta, hogy a lézerindukált hátsóoldali nedves maratási eljárás (LIBWE) alkalmas szubmikrométeres struktúrák kialakítására kvarc mintán. Az általuk kidolgozott két-nyaláb interferenciás-LIBWE módszert továbbfejlesztették, s immerziós folyadék segítségével 104 nm periódusú rácsot martak kvarcba ns-os KrF excimer lézerrel. Ez az érték ebben a pillanatban világcsúcsnak számít. A LIBWE analógiájára kifejlesztett lézeres hátsóoldali száraz maratási (LIBDE) módszer főbb paramétereit vizsgálták, kidolgoztak egy modellt a maratási folyamat leírására. Kimutatták, hogy az eljárás látható hullámhosszon működő lézerek esetében is alkalmazható.

Megépítettek egy mátrix anyaggal elősegített lézeres párologtató elrendezést, melynek segítségével sikerült olyan, bomlékony biológiai anyagból álló vékonyréteget készíteniük, mint pl. az ureáz. Továbbá különböző lézeres kémiai, strukturálási, rétegleválasztási eljárásokkal sikerült olyan felületeket kialakítaniuk, melyeken irányított sejtmegtapadást, növekedést valósítottak meg. Az elért eredmények az élő sejt-alapú bioszenzor technikában lehetnek jelentősek, rendelkezhetnek potenciális alkalmazási lehetőséggel.

*Fotoakusztika.* A kutatócsoportban a korábbiakban kifejlesztett fotoakusztikus mérőrendszereket továbbfejlesztették, és alkalmazási körüket szélesítették érzékenységük javításával, szelektivitásuk növelésével. Prekoncentrációs egység alkalmazásával a fotoakusztikus ammóniamérő érzékenysége több mint 2 nagyságrenddel növekedett, elérvén a ppb nagyságrendet. Amennyiben a létrejött berendezés terepi mérésekre is alkalmasnak bizonyul, akkor várhatóan komoly piaci értékkel rendelkezik majd, mivel ilyen ppb érzékenységű műszer legjobb tudomásuk szerint jelenleg nem kapható a kereskedelemben. Egy, az Európai Unió által támogatott nemzetközi projekt keretében megépített vízgőz-mérő berendezés új generációját fejlesztették ki. Az új rendszer lényegesen kisebb hőmérsékletérzékenységgel bír, továbbá a hosszú idejű stabilitása is sokkal jobb. Emellett a Phalcon NitroEurope c. FP6-os integrált projekt keretei között repülőgépes méréseket végeztek alacsonyabb mérési magasságokban. Bebizonyosodott, hogy a fotoakusztikus mérőrendszer alacsony repülési magasságokban is megbízhatóan működik.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

*Hazai:* a SOTE és a SZTE Szemészeti Klinikái, a SZTE-MTA Dermatológiai Kutatócsoportja, az MTA SzBK, SZFKI, MFA, ATOMKI és az ELTE kutatóhelyei, a MOL Rt. és a Videoton Holding Rt.

*Nemzetközi:* A kutatók folyamatos munkakapcsolatban álltak a CNRS InESS Laboratóriumával (Franciaország), a Johannes Kepler Egyetem Alkalmazott Fizikai Intézetével (Linz, Ausztria), a TU München Kémiai Intézetével, a Forschungszentrum Karlsruhe-val (Németország), a Laboratoire d'Optique Appliquée, Groupe Etude des Lasers Femtosecondes csoporttal (Palaiseau, Franciaország) az Uppsala University Angstrom Laboratóriumával (Svédország), a National Institute for Lasers, Plasma and Radiation Physics, Lasers Department-jével (Bucharest-Magurele, Romania), a Texas A&M University villamosmérnöki tanszékével valamint a FORTH Lézer Laboratóriumával (Görögország).

A kutatócsoport tagjai a SZTE Optikai és Kvantumelektronikai Tanszéke oktatási feladatainak ellátásában éves szinten mintegy 530 óra megtartásával vállaltak részt. Továbbá 14 PhD-hallgató, 8 diplomamunkát és szakdolgozatot író, valamint 7 tudományos diákköri munkát végző hallgató munkáját irányították.

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A 2007-es év folyamán a kutatócsoport tagjai 4 db hazai (2 db OTKA és 2 db NKFP) pályázatot nyertek el. Emellett több futó hazai (3db OTKA, 4 NKTH) és 2 db EU FP6 pályázat finanszírozta a kutatási költségeket.

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

1. Elihn, K, Landtsröm, L, Alm, O, Boman, M, Heszler, P: „Size and structure of nanoparticles formed via UV photolysis of ferrocene”, J. Appl. Phys. 101, Art. No.034311 (2007)
2. Osvay, K, Varjú, K, Kurdi, G: „High order dispersion control for femtosecond CPA lasers”, Appl. Phys. B, 89 565–572 (2007)
3. Rajta, I, Szilasi, SZ, Budai, J, Tóth, Z, Petrik, P, Baradács, E: „Refractive index depth profile in PMMA due to proton irradiation”, Nucl. Inst. and Methods in Phys. Res. B, 260, 400–404 (2007)
4. Smajda R, Kukovecz A, Hopp B, Mohl M, Kónya Z, Kiricsi I: „Morphology and N<sub>2</sub> Permeability of Multi-wall Carbon Nanotube – Teflon Membranes”, J. of Nanoscience and Nanotechnology 7, 1604–1610 (2007)
5. Szakáll, M, Csikós, J, Bozóki, Z, Szabó, G: „On the temperature dependent characteristics of a photoacoustic water vapor detector for airborne application”, Infrared Physics and Technology 51, 113–121 (2007)
6. Bozóki Z, Mohácsi Á, Szabó G, Hegedűs VA: „Eljárás és berendezés gázminta szennyező-összetevőinek fotoakusztikus elvű szelektív meghatározására egymástól spektrálisan távoli gerjesztő hullámhosszak felhasználásával”, P0501060 alapszámú magyar szabadalmi bejelentés, Szabadalmi Közlöny és Védjegyértesítő 5, (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	9	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			35
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			35
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	26
nemzetközi együttműködés keretében:	12	SCI által regisztrált folyóiratban:	26
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	41,825	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	438
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			334
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	2	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	6	posztterek száma:	17
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	4	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	4	Gyakorlati kurzusok száma:	6
TDK munkát készítő hallgatók száma:	7	Diplomamunkát:	8
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	14
			530
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			37 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	97,7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	27,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			4
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	31 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,7 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,5 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	16 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	17 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## SZTE MESTERSÉGES INTELLIGENCIA KUTATÓCSOPORT

Vezető: Csirik János, az MTA doktora  
6720 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.  
Telefon: (62) 544–126, Fax: (62) 425–508  
e-mail: csirik@inf.u-szeged.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A csoport a beszámolási évben alapvetően azokon a területeken folytatott kutatásokat, mint az előző ciklus befejezésekor. A fő hangsúly tehát továbbra is a gépi tanulási algoritmusokon és azok alkalmazásain volt. Az alkalmazások közül kiemelkedő szerepet kapott a nyelvtechnológia, mivel a csoport dolgozói bekapcsolódtak az SZTE Informatikai Tanszékcsoportja által elnyert nagy volumenű pályázatok feladatainak végrehajtásába. Emellett folytatódtak a beszédfelismerési kutatások, valamint a bioinformatika, az önszervező rendszerek és a gépi tanulás elmélete területén korábban megkezdett kutatási tevékenységek és együttműködések.

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

*Természetes nyelvi feldolgozás.* A nyelvfüggetlen névelemfelismerés témában a korábbi kutatásokat folytatva az intézet dolgozói olyan heurisztikákat fejlesztettek ki, amelyek webes statisztikák vagy online enciklopédiákban talált információk alapján képesek finomítani a névelemfelismerő rendszerek pontosságát. A 2006-os kutatások továbbfejlesztéseiről a Journal of American Medical Informatics Association lapban jelent meg cikkük az orvosi dokumentumok anonimizálása témakörben. A radiológiai leletek BNO-kódolása témakörében egy nemzetközi kutatás-fejlesztési versenyen vettek részt a csoport kutatói, ahol az általuk kifejlesztett modell a legjobb minősítést érte el (44 intézet közül). A témához kapcsolódó gépi tanulási kísérleteket a Languages in Biology and Medicine nemzetközi szimpóziumon ismertették, melynek anyagát a BMC Bioinformatics lap 2008-as közlésre elfogadta. A névelemek metonimikus használatának felismerése témában a csoport kutatói indultak egy, az Association of Computational Linguistics által kiírt nyílt kutatás-fejlesztési versenyen, és 5 résztvevő közül az első helyen végeztek. A Magyar WordNet projekt – amely a csoport koordinációja alatt zajlott – 2007 tavaszán zárult. Eredményeként létrejött a EuroWordNet szabványt követő magyar ontológia, illetve letették az alapjait a későbbi magyar nyelvű jelentés-egyértelműsítési kutatásoknak. A magyar-angol gépi fordítórendszer előállítását célzó projekt keretében a konzorcium elkészítette a fordítórendszer architektúráját és meghatározta a nyelvtan építésének folyamatát, melynek során a nyelvi szabályok, a névszói szerkezetek és az igei vonzatkeretek beépültek a fordítóprogram központi rendszerébe. A fordítóprogramra három alkalmazás épült: egy példamondat-fordító, egy képernyőre írt szöveg megértését támogató program, és egy sablonkitöltő fordító, melyek elérhetők a [www.webforditas.hu](http://www.webforditas.hu) oldalon. A csoport kutatói bekapcsolódtak továbbá egy pszichológiai célú szövegelemzést kitűző projektbe, melynek célja a nemzeti és etnikai identitás vizsgálata történelmi eseményekre vonatkozó szövegek narratív alakzatainak számítógépes tartalomelemzése révén. A csoport dolgozói a kutatást egy szemantikai jegyekkel annotált főnévi adatbázis létrehozásával támogatták. Az eredményeket 11 fős kutatói team érte el, amelyből 5 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 9 M Ft volt, továbbá 12,5 M Ft pályázati forrásból. A projektek ipari partnerek részvételével futnak, így gazdasági hasznosulásuk bizonyosra vehető.

*Beszédfelismerés.* Folytatódott a korábbi években kifejlesztett orvosi diktálórendszer finomítása, különös tekintettel a hatékonyság növelésére, amit különféle vágási technikák kifejlesztésével próbáltak elérni a csoport kutatói. Emellett tovább vizsgálták a különféle beszélőnormalizálási és -adaptációs algoritmusokat, amelyekkel szintén jelentős javulást sikerült produkálni. Kifejlesztettek továbbá egy, a tanító adatokat iteratíván újraszűző eljárást a folyamatos felismerés hatékonyságának növelése érdekében. A neuronhálós beszédfelismeréssel kapcsolatos kutatások is folytatódtak, új eredményeket sikerült elérni a HMM/ANN hibrid felismerőrendszerek magyar nyelv felismerésére történő felhasználásában. Az új eredmények részben az ún. modulációs spektrumon alapuló jellemzőkinyerési módszer bevezetésének voltak köszönhetőek. Az eredményeket 5 fős kutatói team érte el, amelyből 3 dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 8 M Ft volt, továbbá 1,7 M Ft pályázati forrásból. A gazdasági hasznosításhoz a csoport keresi az ipari partnereket.

*Mintafelismerés és gépi tanulás.* A gépi tanulás elmélete terén a 2007-es évben a csoport kutatói többek között a DNF-tautológiák és döntési fák kapcsolatát vizsgálták. Kiterjesztették a korábbi, DNF-tautológiák fastruktúrájára vonatkozó tételüket arra az esetre, amikor a DNF-tautológiában minden term minden másik termmel legalább egy, de legfeljebb két változóban ütközik. Azt is bebizonyították, hogy a tétel tovább nem általánosítható. A tudásreprezentáció témakörében elkezdett kutatások is folytatódtak: a cél olyan algoritmusok létrehozása, melyek hatékony tanulás mellett a korábbiaknak ellentmondó új információ érkezése esetén képesek a tudásbázis racionális átalakítására. 2007-ben e kérdést a Horn-formulák keretében vizsgálták a csoport kutatói, és a belief revision, illetve a felvetődő kombinatorikus problémák irányában értek el új eredményeket. Az alkalmazott gépi tanulás terén a team kutatói kifejlesztettek egy ellenpélda-generáláson alapuló egyosztályos tanulómódszert. Ennek lényege, hogy a csak pozitív példákat tartalmazó tanító halmaz elemeiből mesterségesen ellenpéldákat állít elő, s így már kétsz osztályos osztályozót lehet alkalmazni a pozitív és negatív példák szétválasztására. Az eredményeket 7 fős kutatói team érte el, amelyből 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 6 M Ft volt, továbbá 2,5 M Ft pályázati forrásból.

*Bioinformatika.* A csoport kutatói a Szegedi Biológiai Központ kutatóival együttműködve új algoritmusokat dolgoztak ki a fehérjeklasszifikáció, valamint a filogenetikus fák építésének témakörében. Az előbbi területen bevezettek egy új, Kolmogorov-komplexitáson alapuló távolságfüggvényt, valamint egy gépi tanuláson alapuló hasonlósági mértéket, amely evolúciós információra is támaszkodik az osztályozás során. Az utóbbi területen kifejlesztettek egy új filogenetikus faépítő módszert, amely a hagyományos módszereknél sokkal robusztusabb fát állít elő. Az algoritmus a legkisebb négyzetek kritériuma segítségével értékeli ki a lehetséges fatopológiákat, és mind valós, mind mesterségesen előállított tesztkörnyezetben jónak bizonyult. Az eredményeket 8 fős kutatói team érte el, amelyből 2 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 3 M Ft volt, továbbá 1,3 M Ft pályázati forrásból.

*Önszervező rendszerek.* A 2007. évben a kutatási eredmények elsősorban a kollektív intelligencia és önszerveződés köré rendeződtek. Három területet emelünk ki. Az első a PageRank algoritmus és hasonló algoritmusok teljesen elosztott, ún. peer-to-peer implementációja. E téren a team kutatói a hatványiteráció egy elosztott verzióját javasolták, amely segítségével iteratív algoritmusok széles skálája valósítható meg teljesen elosztott környezetben, hibátűrő módon. A második biológiai folyamatok által inspirált elosztott algoritmusok tervezése, pl. szinkronizáció elosztott rendszerekben. Egyes szentjánosbogár-fajok automatikus szinkron villogását modellezve a csoport kutatói új szinkronizációs algoritmusokat javasoltak peer-to-peer rendszerek számára. A harmadik pedig a pletyka alapú algoritmusok vizsgálata, ahol elosztott rendszerekben különböző szolgáltatások pletyka alapú

implementációit vizsgálták. Az eredményeket egy nemzetközi team érte el, amelyből 1 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 4 M Ft volt, továbbá 2 M Ft pályázati forrásból.

### **III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása**

Kutatási partnereink a különböző területeken: gépi tanulás elmélete: amerikai és német kutatók, SZTAKI; önszervező rendszerek: egy nemzetközi projekt keretében norvég, olasz, német, holland, spanyol, angol kutatók; beszédfelismerés: BME TMiT; természetes nyelvi feldolgozás: MorphoLogic Kft, MTA Nyelvtudományi Intézet, BME MOKK, PTE Pszichológiai Intézet; bioinformatika: olasz kutatók. A kutatócsoport dolgozói részt vettek a 2007. decemberében tartott „V. Magyar Számítógépes Nyelvészeti Konferencia” szervezésében, lebonyolításában. A csoport munkatársai folyamatosan részt vesznek az AICom, illetve Annals of Mathematics and Artificial Intelligence folyóiratok szerkesztőbizottsági munkáiban.

### **IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése**

A kutatócsoport dolgozói a 2007-es évben is jelentős részt vállaltak a csoportot befogadó intézmény, az SZTE Informatikai Tanszékcsoporthoz által vitt pályázatok feladatainak megoldásában. A magyar WordNet projekt (GVOP-19/50/1U108) 2007 tavaszán lezárult, eredményeként létrejött az EuroWordNet szabványt követő magyar ontológia, illetve letették az alapjait a későbbi magyar nyelvű jelentés-egyértelműsítési kutatásoknak. A magyar-angol gépi fordítórendszer projekt (NKFP-19/50/1W051) 2007 közepén lezárult, a fordítóprogramra három alkalmazás épült: egy példamondat-fordító, a képernyőre írt szöveg megértését támogató program, és egy sablonkitöltő fordító, melyek elérhetők a [www.webforditas.hu](http://www.webforditas.hu) oldalon. A pszichológiai célú szövegelemzési projekt (NKFP-19/50/1W075) 2008-ban fog véget érni, 2007 folyamán a kutatás a magyar történelmi múlt traumatikus eseményeire vonatkozó történelmi elbeszélésekben a történetileg változó identitás-konstrukciós stratégiákat kívánta feltárni automatikus nyelvi elemző módszerek segítségével. E feladat végrehajtásához a kutatócsoport nyelvészei főnévi listák szemantikai jegyekkel történő annotálását végezték el.

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

1. Bánhalmi, A, Paczolay, D, Tóth, L, Kocsor, A: Development of a Hungarian Medical Dictation System, Informatica, 31(2): 241–246 (2007)
2. Tóth, L, Kocsor, A: A segment-based interpretation of HMM/ANN hybrids, Computer Speech And Language, 21(1): 562–578 (2007)
3. Costa P, Gramoli, V, Jelascity, M, Jesi, GP, Le Merrer, E, Montresor, A, et al.: Exploring the interdisciplinary connections of gossip-based systems. ACM SIGOPS Operating Systems Review, 41(5): 51–60 (2007)
4. Jelascity, M, Voulgaris, S, Guerraoui, R, Kermarrec, AM, van Steen, M: Gossip-based peer sampling. ACM Transactions on Computer Systems, 25(3): Article No. 8 (2007)
5. Berman, P, DasGupta, B, Mubayi, D, Sloan, RH, Turán, Gy, Zhang, Y: The inverse protein folding problem on 2D and 3D lattices, Discrete Applied Math. 155: 719–732 (2007)



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport

Átlagléttség <sup>1</sup> :	8	Ebből kutató <sup>2</sup> :	7,5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			38
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			38
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	12
nemzetközi együttműködés keretében:	16	SCI által regisztrált folyóiratban:	15
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	12,42	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	31
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			25
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	5
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	7	posztterek száma:	4
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	0	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	0	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	5
			42
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			28 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## SZTE SZTEREOKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Vezető: Fülöp Ferenc, az MTA levelező tagja  
6720 Szeged, Eötvös utca 6.  
Telefon: (62) 545–562, Fax: (62) 545–705  
e-mail: fulop@pharm.u-szeged.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A 2006 évi eredményes pályázat alapján az Organikus Katalízis és a Heterociklusos Kémiai Kutatócsoportokból Fodor Gábor akadémikus tiszteletére alakult az MTA-SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport-ja.

A szerves sztereokémiai kutatások egyik legfontosabb területe az aszimmetrikus szintézisek vizsgálata, amelyekben katalizátorként királis szerves katalizátorok, valamint a heterogén katalitikus kémiai reakciók előnyeit ismerve kiemelkedő enantioszelektivitást biztosító különböző típusú királis nanokompozitok kifejlesztését és felhasználását tervezik úgy, hogy a munkák alap kutatás jellege mellett, az előállított vegyületek a gyógyszerkutatásban hasznos, jelentős tudást hordozó királis, biofor építőelemek legyenek. Az enantioszelektív katalitikus szintézisek bevezetéséhez meghatározó jelentőségű alap kutatási feladat a reakciók mechanizmusának és sztereokémiájának tanulmányozása, különösen újabb, a szakirodalomban eddig még nem alkalmazott módszerekkel. Ezen belül olyan kiemelten fontos feladatok várnak megoldásra, mint a királis indukció eredetének értelmezése, a reakcióért felelős intermedierek szerkezetének felderítése és számos, a reakciókkal kapcsolatos kérdések megválaszolása. Ehhez elsősorban a katalizátorok, a királis információt biztosító vegyületek és a reaktánsok közötti kölcsönhatások jellegét kell sokoldalú vizsgálatok útján megismerni.

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

Kihhasználva azt a megfigyelést, hogy a ciklopenténvázis laktámok illetve aminosavészterek ellenkező diasztereoselektivitással epoxidálhatók, majd az epoxid régió- és diasztereoselektíven nyitható azidokkal, nagyszámú ortogonálisan védett diaminociklopentán-karbonsav enantiomert állítottak elő. Enantiomertiszta monoterpénekből hasonló régió- és diasztereoselektív módon új, ciklusos béta aminosavakat nyertek. Béta laktámok enzimkatalizálta enantioszelektív felnyitása szintén enantiomer béta aminosavakat eredményezett. A tervek szerint a béta aminosavak foldamer szerkezetű peptidok szintéziséhez szolgálnak kiindulási anyagként (3 főből 1 kut. csop. tag; 10 M Ft ráfordításból 4 M Ft külső forrás).

Aceton és  $\alpha$ -szubsztituált  $\beta$ -ketoészterek enantioszelektív aldolkondenzációját tanulmányozták L- és D-prolin, valamint L-prolinol királis bázis katalizátorok hatására különböző oldószerekben és oldószerelegyekben. Legnagyobb optikai hozamot (83%) az aceton és a 2-fluoro-acetoacetát reakciójában érték el. Ez volt az első publikált organokatalitikus fluoroketon-keton aldol addíciós reakció (2 főből 0,5 kut. csop. tag; 8.4 M Ft ráfordításból 2 M Ft külső forrás).

Prokirális C=C kötést tartalmazó vegyülettípusok közül különböző szerkezetű  $\alpha,\beta$ -telítetlen karbonsavak, telítetlen dikarbonsavak, valamint N-acilamino dehidrokarbonsavak és néhány

származékának (összesen 11 különböző vegyület) enantioszelektív hidrogénezését vizsgálták folyadékfázisban sztatikus és átáramlásos reaktorokban is. Különböző oxidhordozós királis anyagokkal módosított (számos királis módosító közül főként cinkóna alkaloidok és származékaik) palládium katalizátorokat használtak a hidrogénezésekben. A minél nagyobb optikai hozam elérése céljából számos kísérleti paraméter hatását vizsgálták: hőmérséklet, hidrogénnyomás, a királis módosító koncentrációja, adalékanyagok, adagolás módja és sebessége, oldószerek. Az elért legnagyobb optikai hozam 70% volt. Az optimalizálás során összefüggéseket lehetett megállapítani az enantioszelektivitások, a királis módosítók hatása és a hidrogénezendő reaktánsok szerkezete között. A dehidroaminosav származékok heterogén katalitikus enantioszelektív hidrogénezésében elért 60%-os optikai hozam a legnagyobb, amit a szakirodalomban eddig leírtak (4 főből 2 kut. csop. tag; 10 M Ft ráfordításból 4 M Ft külső forrás).

Prokirális oxovegyületek kutatásában a korábbi vizsgálatok folytatásaként új ismeretekre tettek szert a legtöbbet kutatott heterogén katalitikus hidrogénezési eljárás, az Orito reakció területén. Az enantioszelekció általuk felismert inverziójának részletes vizsgálatával NMR-rel jelentős új adatokat szolgáltatottak a reakció mechanizmusához és új összefüggéseket tártak fel a királis módosítók konformációjának szerepéről. Megállapították, hogy az enantioszelekcióért felelős intermedier egy 1:1  $\beta$ -izocinkonin ( $\beta$ -ICN) - ketopantolakton (KPL) felületi komplex, amelyben a  $\beta$ -ICN nukleofilként kapcsolódik a KPL-hez. Az új kísérleti eredmények alapján megállapítást nyert, hogy a hidrogénezés mechanizmusában az oldószerektől függően (AcOH, toluol) sokkal nagyobb a különbség, mint amit a szakirodalomban korábban feltételeztek (4 főből 2,5 kut. csop. tag; 10 M Ft ráfordításból 2,4 M Ft külső forrás).

Új, szabadalmaztatott, környezetkímélő eljárásokat dolgoztak ki a gyógyszerkutatásban fontos építőelemek szintézisére. Szabadalmat nyújtottak be, az eddigi adatok szerint igen komoly hatékonysággal rendelkező rákellenes szer kifejlesztésére.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

*Hazai együttműködő intézmények:* SZTE Orvosi Vegytani Intézet, SZBK Biokémia Intézet, ELTE Kémiai Intézet, SOTE Anatómiai Intézet,

*Külföldi együttműködő intézmények:* Univ Turku, Univ Ghent, Univ Jouensuu, Univ. Jyväskylä,

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport kutatásait az Országos Tudományos Kutatási Alap (T048764, D 048512, T047409) támogatta.

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

1. Tasnádi G, Forró E, Fülöp F: Candida antarctica lipase B-catalyzed ring opening of 4-arylalkylsubstituted  $\beta$ -lactams, Tetrahedron: Asymmetry, 18, 2841–2844 (2007)
2. Szakonyi Zs, Martinek T A, Sillanpää R, Fülöp F: Regio- and stereoselective synthesis of the enantiomers of monoterpene-based  $\beta$ -amino acid derivatives, Tetrahedron: Asymmetry, 18, 2442–2447 (2007)

3. Kiss L, Forró E, Sillanpää R, Fülöp F: Diastereo- and enantioselective synthesis of orthogonally protected 2,4-diaminocyclopentanecarboxylates: a flip from  $\beta$ -amino- to  $\beta,\gamma$ -diaminocarboxylates, *J. Org. Chem.*, 72, 8786–8790 (2007)
4. London G, Szöllősi Gy, Bartók M: Organocatalytic direct aldol reaction between acetone and  $\alpha$ -substituted  $\beta$ -keto esters, *J. Mol. Catal. A: Chem.*, 267, 98–101 (2007)
5. Martinek T A, Varga T, Fülöp F, Bartók M: NMR spectroscopic and theoretical evidence of cinchona alkaloid-ketopantolactone complex formation in aprotic solvents: Implications for the mechanism of Pt-catalyzed enantioselective hydrogenation of activated ketones, *J. Catal.*, 246, 266–276 (2007)
6. Szöllősi Gy, Szabó E, Bartók M: Enantioselective hydrogenation of N-acetyldehydroamino acids over supported Palladium catalysts, *Adv. Synth. Catal.*, 349, 405–410 (2007)
7. Szöllősi Gy, Balázsik K, Bartók M: Enantio selective hydrogenation of itaconic acid over cinchona alkaloid modified supported palladium catalyst, *Appl. Catal. A-Gen.*, 319, 193–201 (2007)
8. Balázsik K, Martinek T A, Bucsi I, Szöllősi Gy, Fogassy G, Bartók M, Olah G A: A new rigid cinchona modified ( $\alpha$ -IQ) platinum catalyst for the enantioselective hydrogenation of activated ketones: data to the origin of enantioselection, *J. Mol. Catal. A: Chem.*, 272, 265–274 (2007)
9. Hermán B, Szöllősi Gy, Fülöp F, Bartók M: Enantioselective hydrogenation of  $\alpha,\beta$ -unsaturated carboxylic acids in fixed-bed reactor, *Appl. Catal. A: Gen.*, 331, 39–43 (2007)
10. Szöllősi Gy: Prokirális telítetlen karbonsavak enantioszelektív hidrogénezése módosított heterogén katalizátorokon, *Magyar Kémiai Folyóirat*, 113, 146–153 (2007)
11. Forró E, Fülöp F: Enzymatic resolution process for the preparation of cyclic beta-amino acid and ester enantiomers *PCT Int. Appl.* (2007), 32pp. CODEN: PIXXD2 WO 2007091110 A1 20070816 CAN 147:256370 AN 2007:906125 CAPLUS (szabadalom).
12. Fülöp F, Szakonyi Z, Eljárás enantiomer Béta aminosavszármazékok előállítására (szabadalom bejelentés).

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			11
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			11
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	10
nemzetközi együttműködés keretében:	0	SCI által regisztrált folyóiratban:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	39,1	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	540
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			493
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	1
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	1
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	3	posztterek száma:	6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			3
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	1	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	1	Gyakorlati kurzusok száma:	3
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	6
			250
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			26 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		12,4 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## SZTE SZUPRAMOLEKULÁRIS ÉS NANOSZERKEZETŰ ANYAGOK KUTATÓCSOPORT

Vezető: Penke Botond, az MTA rendes tagja  
6720 Szeged, Dóm tér 8.  
Telefon: (62) 545–136, Fax: (62) 545–971  
e-mail: penke@mdche.u-szeged.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Szupramolekuláris fehérje aggregátumok szerkezete, neurotoxikus hatása és új neuroprotektív gyógyszerjelölt vegyületek kutatása:

- Polipeptidek aggregációjának vizsgálata molekulamodelllezési módszerekkel. A polipeptid aggregátumokhoz kötődő, a felszín beborító vagy  $\beta$ -szerkezetromboló hatású peptidomimetikumok tervezése és szintézise;
- A potenciális gyógyszerjelölt vegyületek neuroprotektív hatásának in vitro screenelése sejtenyészeten. ACE-inhibítorok és új cinkion-kelátorok vizsgálata Alzheimer-kór modellekben;
- A gyógyszerjelölt vegyületek hatásának in vivo vizsgálata.

Nanobiotechnológia: nanorészecskék szintézise, vizsgálata és biológiai alkalmazási lehetőségei:

- Nemesfém monodiszperz nanorészecskék szintézise és biológiai alkalmazása;
- Félvezető nanorészecskék szintézise;
- Mikrokalorimetriás vizsgálatok a nanorészecske képződés és a felületi funkcionizálás termodinamikájának kutatásában.

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

Molekuladinamikai (MD) módszerekkel modellezték a poli-alanin és a poli-glutamin feltekeredését, elvégezték a poli-glutamin konformáció analízisét MD szimulációk alapján. Az Autodock 4 program segítségével vizsgálták a toxikus Gln<sub>40</sub> molekula felszínére kötődő ligandumokat; ezek a kismolekulájú vegyületek kivédik a poli-Gln toxikus hatását és így a Huntington-kór lehetséges gyógyszerei. A  $\beta$ -amiloid 1-42 (A $\beta$ 42) peptid oligomer modelljének felszínéhez is kismolekulájú peptidomimetikumokat illesztettek, modellezték a kötődés erősségét. A legjobban kötődő molekulákat szintetizálták. (2 fős kutatócsoport, MTA-TKI; 6 M Ft)

Az előzőleg előállított új vegyületeket sejtenyészeten (in vitro) tesztelték, hogy kipróbálják neuroprotektív hatásukat (MTT-teszt). Az angiotenzin konvertáz enzim (ACE) néhány ismert inhibitorát (Captopril®, Perindopril®) is megvizsgálták: hogyan befolyásolják ezek a cink-kelátorok a cinkionok eloszlását az idegsejtekben és azok környékén. A Perindopril® jó hatásúnak bizonyult; ez a vérnyomáscsökkentő gyógyszer beválhat az Alzheimer-kór megelőzésében is (másodlagos szabadalom). (1 fő, MTA-TKI; 4 M Ft)

Az 1.2-1.4 pont legjobb új vegyületeit in vivo elektrofiziológiával és tanulási tesztekkel vizsgálták és bizonyították neuroprotektív hatásukat. Ezek az új anyagok is az Alzheimer-kór potenciális gyógyszerei. (1 fő, MTA-TKI; 5 M Ft)

Arany nanorészecskék kontrollált vizes közegű szintézisét dolgozták ki különböző redukáló és stabilizáló szerek alkalmazásával. Az 1-50 nm tartományban szintetizált arany

nanorészecskéket Na-citráttal redukáltak és stabilizáltak. Azonosításuk UV-VIS spektrumaik plazmon rezonancia maximum értékeik alapján történt. A keletkezett részecskék méretét, méreteloszlását TEM képek analízisével határozták meg. Az arany nanorészecskék felületét ciszteinnel módosították és UV-VIS spektrumok meghatározásával tanulmányozták a pH valamint a cisztein koncentráció növelésének hatását, mely az abszorbancia maximumok jelntős eltolódását eredményezi. Vizsgálták a glutation tripeptid felületmódosító hatását UV-Vis. Az arany nanorudak növekedésének folyamatát tanulmányozták kétdimenziós rendszerben. Az arany nanorudakhoz ciszteint és glutationt kapcsoltak és mivel az arany nanorészecskék a felületen kötött állapotban vannak, a cisztein és a glutation hozzáadására csak kismértékű változás figyelhető meg a rezonancia maximum értékeknél(1 fő, MTA-TKI; 5 M Ft)

Szol-gél alapú módszerrel foszfátokkal funkcionizált titán-dioxid mintákat állítottak elő. Különböző proteinek, BSA, lizozim, papain, hemoglobin adszorpcióját vizsgálták optikai hullámvezető fénymódus spektroszkópiával. A proteinek kötődését módosítatlan és szilánokkal funkcionizált TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> hullámvezető szenzorokon egyaránt tanulmányozták. A kísérletek célja olyan immunoszenzorok kifejlesztése, amelyekkel jelölésmentesen detektálható a proteinek, peptidek felületi kötődése. A protein immobilizációt követően protein-protein kölcsönhatásokat tanulmányoztak. A modelljükben az egyik fehérjét (galektin-1) a funkcionizált SiO<sub>2</sub> hullámvezető szenzoron rögzítették, majd ezen felületen egy másik protein (asialofetuin) specifikus kötődését tanulmányozták. (1,5 fő, MTA-TKI; 6 M Ft)

Fehérjék aggregációs tulajdonságait vizsgálták mikrokolorimetrias módszerrel. A kísérletek során marha szérum albumint (BSA), papaint és lizozimot használtak. Különböző protein koncentrációknál széles pH tartományban azt vizsgálták, hogy a fehérjék dinamikus fényszórással jellemezhető szerkezeti változásai milyen kalorimetrikusan is detektálható entalpiaváltozást mutatnak. Ezen hőeffektusok kapcsolatba hozhatók a fehérje konformációjának megváltozásával. Vizsgálták továbbá a BSA és cink-ionok közötti kölcsönhatást cink-kelátorok jelenlétében és azok nélkül. Kimutatták, hogy a cink-ionok nagyobb affinitással létesítenek kötést a kelátorokkal, mint a fehérjével, így valószínűsíthető, hogy a fehérje natív szerkezete megóvható kelátorok adagolásával, továbbá elkerülhető a proteinek (illetve polipeptidek) aggregációja, amely mai ismereteink szerint számos neurodegeneratív betegség kiváltó oka lehet. (1,5 fő, MTA-TKI; 6 M Ft)

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

- Kellermayer M., PTE – A $\beta$  fibrillumok stabilizálása
- Fülöp F., SZTE - A $\beta$  fibrillumok NMR szerkezetvizsgálata
- Richter G. Zrt. – Alzheimer-kór ellenes gyógyszerek fejlesztése
- Zrínyi M., BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék – Protein oldatok és gélek fizikai -kémiai tulajdonságainak vizsgálata
- P.G.M. Luiten, University of Groningen – A $\beta$  aggregáció szimulációs számítások
- F.M. Bickelhaupt, Free University of Amsterdam–Mesterséges nukleobázisok modellezése
- M. Przybylski, University of Konstanz- A $\beta$  aggregáció tömegspektrometriás követése
- H. Busse, Fraunhofer Institute (IFAM) Bremen, – Félvezető és szenzorkutatások
- R. Schoonheydt, Catholic University Leuven – Protein adszorpciós kutatások rétegszilikátokon

#### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2007-ben elnyert új pályázataik:

- FP-7 (projektszám 201159): MEMOLOAD – Neurobiological Mechanisms of Memory loss in Alzheimer Disease (FP-7-Health-2007-A; collab. project) 100000Eur, 2008–2012
- OTKA 73672(NK), Béta-amiloid peptidek aggregációja és kölcsönhatása fehérjékkel; új neuroprotektív vegyületek alkalmazása az Alzheimer-kór megelőzésére 21 M Ft; 2008–2010
- OTKA K73307 Önszerveződő hibrid filmek előállításának nanoszerkezetű anyagokból Témavezető: Dr.Dékány Imre, 26 M Ft

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

1. Walter S, Letiembre M, Liu Y, Heine H, Penke B, Hao W, Bode B, Manietta N, Walter J, Schulz-Schaffer W, Fassbender K: Role of the toll-like receptor 4 in neuro-inflammation in Alzheimer's disease, Cellular Physiology And Biochemistry 20(6): 947–956 (2007)
2. Leitgeb B, Kerenyi A, Bogar F, Paragi G, Penke B, Rakhely G: Studying the structural properties of polyalanine and polyglutamine peptides, Journal Of Molecular Modeling 13(11): 1141–1150 (2007)
3. Datki ZL, Hunya A, Penke B: A novel and simple fluorescence method for the measurement of presynaptic vesicular zinc release in acute hippocampal slices with a fluorescence plate reader, Brain Research Bulletin 74(1-3): 183–187 (2007)
4. Sipos E, Kurunczi A, Kasza A, Horvath J, Felszeghy K, Laroche S, Toldi J, Parducz A, Penke B, Penke Z: Beta-amyloid pathology in the entorhinal cortex of rats induces memory deficits: Implications for Alzheimer's disease, Neuroscience 147(1): 28–36 (2007)
5. Zarandi M, Soos K, Fulop L, Bozso Z, Datki Z, Toth GK, Penke B: Synthesis of A beta(1-42) and its derivatives with improved efficiency, Journal of Peptide Science 13(2): 94–99 (2007)
6. Patakfalvi R, Papp S, Dekany I: The kinetics of homogeneous nucleation of silver nanoparticles stabilized by polymers, Journal of Nanoparticle Research 9(3): 353–364 (2007)
7. Hornok V, Dekany I: Synthesis and stabilization of Prussian blue nanoparticles and application for sensors, Journal of Colloid and Interface Science 309(1): 176–182 (2007)
8. Szabo TS, Szekeres M, Dekany I, Jackers C, De Feyter S, Johnston CT, Schoonheydt RA, Layer-by-layer construction of ultrathin hybrid films with proteins and clay minerals, Journal of Physical Chemistry C 111(34) 12730–12740 (2007)
9. Korosi L, Oszko A, Galbacs G, Richardt A., Zöllmer V, Dékány I: Structural properties and photocatalytic behaviour of phosphate-modified nanocrystalline titania films, Applied Catalysis B-Environmental 77(1-2) 175–183 (2007)
10. Kristo K, Bajdik J, Eros I, Dekany I, Pallai Z, Pintye-Hodi K: Formulation of an intermediate product from human serum albumin for the production of a solid dosage form, EUROPEAN Journal of Pharmaceutical Sciences 32(1) S35-S35 Supplement: Suppl. S (2007)



## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			27
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			26
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	26
nemzetközi együttműködés keretében:	9	SCI által regisztrált folyóiratban:	23
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	59,571	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	433
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			384
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	2
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	6	posztterek száma:	20
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	4	Doktori iskolát vezetőik száma:	1
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	8	Gyakorlati kurzusok száma:	6
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát:	6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	4
			656
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			25,4 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	42 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			2
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	25 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	15,4 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			1
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,5 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## SZTE BIOSZERVETLEN KÉMIAI KUTATÓCSOPORT (TÁRSULT TAG)

Vezető: Kiss Tamás, az MTA doktora  
6720 Szeged, Dóm tér 7. 6701 Szeged, Pf. 440.  
Telefon: 06 (62) 544–337, Fax: 06 (62) 420–505  
e-mail: tkiss@chem.u-szeged.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Biológiai fontosságú inzulinutánczó VO(IV) és Zn(II) komplexek, illetve különböző bioligandumok Al(III)-, organoón(IV)-, Cu(II)- és Zn(II)komplexeinek oldategyensúlyi (pH-potenciometria) és szerkezeti (UV-Vis, multinukleáris NMR, EPR, CD, Mössbauer, Raman és IR spektrális) vizsgálata kémiai és fizikai sajátságai leírása, tulajdonságai előnyös megváltoztatása, az élő szervezetben lejátszódó átalakulásainak, biospeciációjuk megismerése, illetve a Cu(II)- és Zn(II)komplexek esetén hidroláz és oxido-reduktáz funkciójuk tesztelése céljából.

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

*Inzulinutánczó vanádium- és cinkkomplexek biospeciációjá.* Az antidiabetikus VO(IV)komplexek esetén valódi vérérum mintákat használva HPLC–ICP-MS módszerrel az eddigi mesterséges modellekkel végzett méréseikkel illetve számításaikkal összhangban, sikerült bizonyítaniuk, hogy a VO(IV) szinte kizárólag a transferrinhez kötődik, míg az albumin gyakorlatilag nem köti a fémiot. Ez nagy sikere az egész problémakör modellszámításokon alapuló megközelítésének, amit évekkel ezelőtt célul tűztek ki.

*β-amiloid aggregáció.* Folytatódtak a kutatások alkalmas Zn(II)-kelátorok előállításának irányába, melyek potenciális gyógyszerei lehetnek az Alzheimer-kórnak. Korábbi eredményeikre alapozva előállítottak két további peptidet, a HHKH-NH<sub>2</sub>-t és a (GH)<sub>2</sub>K-NH<sub>2</sub>-t; mindkettő képes a cinket fiziológias pH-n oldatban tartani. A (GH)<sub>2</sub>K-NH<sub>2</sub> elágazó láncú peptid két Zn(II)-iont képes egyszerre megkötni, pH 7,4-en, amelyben a két Zn(II) koordinációja a terminális aminosoport, a His amid-N és az imidazol-N részvételével valósul meg a molekula két végén. Megvizsgálták a két peptid Zn(II)-kötő képességét β-amiloid(1-40) jelenlétében, fluorimetriás módszerrel. A mérések alapján úgy tűnik, hogy a peptidek jelenlétében csökken a Zn(II) indukálta amiloid aggregáció. A peptidek biológiai tesztelésre várnak.

*Az Al(III) speciációjának hatása biológiai rendszerekben.* A neurotoxikus Al(III) biológiailag aktív molekulákkal való kölcsönhatásának témakörében befejezésre került két régebbi munka, a cukorszarmazék a glükonsav és a kinasav Al(III)komplexeinek vizsgálata. Potenciometria, NMR spektroszkópia és ESI-MS és részben szilárd fázisú vizsgálatokkal kimutatták és jellemezték a képződő komplexeket, melyek biológiai körülmények között is relevánsak lehetnek.

*Metalloenzimek funkcionális illetve szerkezeti modellezése.* Munkáik folytatásaként vizsgálták az Ac-HKHKH-NH<sub>2</sub> (L1) és Ac-HHKHKKH-NH<sub>2</sub> (L2) peptidek Cu(II)komplexeinek pirokatechin-oxidáz sajátságát. Bár az egy- és kétmagvú komplexek is elősegítik a dtbc oxidációját, részletes vizsgálatokat csak a hatékonyabb 1/1 rendszerben végeztek. Mindkét esetben a pH 9-10 körül képződő CuH–1L komplexek a legaktívabbak. Hatásuk katalitikus, a

kinetika a Michaelis-Menten modellt követi, kisebb koncentrációknál a reakció sebessége első rend szerint függ a szubsztrát, a komplex ill. a dioxigén koncentrációjától. Vizsgálták a H. Ducreyi Cu,Zn-SOD N-terminális peptidje (HGDHMHNDTK) rézkomplexének SOD-utánzó hatását. Úgy találták, hogy a CuHL M). Az amidkoordinációjú komplex kiemelkedő aktivitással bír (IC<sub>50</sub> = 0,19 megakadályozására prolint tartalmazó peptideket állítottak elő (HPHH (L3), HPHPH (L4), KHPHPHQ(L5)). L3 esetén céljaik csak részben valósultak meg, pH 6-8 között az amid-koordinált [CuH-1L3]<sup>+</sup>, majd egy vegyes hidroxokomplex CuH-1L3(OH) képződik. A szuperoxid diszproporcióját az előbbi, a dtbc oxidációját az utóbbi komplex segítette elő. L4 peptid esetén pH 7 fölött vegyes hidroxokomplex válik ki az oldatból Cu(II) és Zn(II) jelenlétében is. Az oldhatóság növelésére a poláros aminosavakat tartalmazó L5 peptidet állítottak elő. Ismereteik szerint ez az első olyan kisméretű peptid, mellyel sikerült a peptidnitrogének deprotonálódásának elkerülésével oldatban tartani a Cu(II) és Zn(II) ionokat pH 7-9 között.

*A ligandumok szilárd hordozón való megkötése* nem csak a katalízis, hanem a káros anyagok eltávolítása miatt is hasznos. Vizsgálataik alapján Cys-tartalmú peptidekkel lehetőség nyílik az As(OH)<sub>3</sub> eltávolítására vizes oldatokból (ez ioncserével/adszorpcióval nem lehetséges). Elsőként a ditioeritritol és ditiotreitol As(III)-kötését tanulmányozták. Ezek már pH 6-nál kondenzációs reakcióba lépnek az As(OH)<sub>3</sub>-val. Ennek révén a ligandum szimmetriája csökken (NMR), ami jó egyezésben van a röntgenszerkezettel: A két láncvégi tiol- és az egyik hidroxilcsoport kapcsolódik a fémionhoz. Ezen eredmények alapján a glutation-S-transzferáz (GST) fehérjéhez molekuláris biológiai úton hozzákötötték a P24 peptidet, ami a két közeli cisztein révén az As(III) és toxikus fémionok megkötésére is alkalmas. Ezt a GST-P24 fúziós fehérjét egy GST affinitásoszlopra kötve bizonyították annak As(III)-kötő képességét. Megállapították, hogy a GST-P24 fehérjét termelő kólibaktériumok ellenállóak az As(III)-mal szemben, illetve képesek azt magukban felhalmozni.

*A komplexek DNS-hez való kötődésének elősegítésére* Lys-tartalmú peptideket (L1, L2 és L5) állítottak elő s igazolták ezek Cu(II)/Zn(II) komplexeinek erős DNS kötését. Bár a vizsgált komplexek mindegyike képes a DNS hidrolitikus hasítását elősegíteni, csak a ZnL5(OH) komplex mutat kiemelkedő aktivitást. Viszont a Cu(II)-L1/L2 komplexek H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> vagy aszkorbinsav jelenlétében már µM koncentrációban is elősegítik a DNS oxidatív hasítását. Korábbi vizsgálataik szerint a peptidek biológiai módszerekkel történő előállítására használt GST fúziós fehérje gátolja a katalitikus funkciót. Újabb kísérleteik során egy nagyobb peptidet, a Colicin E7 nukleáz HNH motívumát (kb. 5 kDa) próbálták előállítani egy kisméretű fehérjéhez az ubikvitinhez (kb. 10 kDa) kötve. A rekombináns Ub-HNH fehérjét E.coli baktériumból sikerült nagy mennyiségben kifejezniük. A fehérje tisztítására eljárást dolgoztak ki, amellyel további vizsgálatokra is alkalmas tisztaságú fehérjeoldatot kaptak. A Zn(II)-Ub-HNH fehérje kölcsönhatást CD vizsgálataik igazolták. A HPHH és a HNH motívum, ill. az elmúlt év során előállított és tanulmányozott P20 és P24 peptidek génjeit molekuláris biológiai módszerekkel a humán adenovírus 5 DNS-ét kötő fehérjékhez csatolták. E fehérjéket sikerült kismennyiségben kifejezni, és a tisztítást optimalizálni. Kimutatták, hogy a fehérjék megtartották specifikus DNS kötő képességüket.

E témakörhöz kapcsolódva létrehoztak egy, az emberi metallotionein-3 fehérjét kódoló plazmidot. Ezzel a plazmiddal sikeresen transzformáltak E.coli baktériumokat. A fehérjekifejezés körülményeinek optimalizálása folyamatban van.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Kutatásaik 2 COST munkacsoportban számos hazai és külföldi kutatócsoporttal való kooperációban folynak, így például a DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékével (Sóvágyó Imre), az ELTE Szerves Kémiai Tanszékével (Hollósi Miklós) és Magkémiai Tanszékével (Vértés Attila) és az MTA Kémiai Kutatóközpontjával (Rockenbauer Antal), a Thesszalonik-i Egyetem Kémia Tanszékével (Prof. A Salifoglou), a Lisszabon-i Műszaki Egyetem Kémia Tanszékével (Prof. J. Costa Pessoa), a Kiotó-i Gyógyszerészeti Egyetem Analitikai és Bioszervetlen Kémiai Tanszékével (Prof. H. Sakurai), a Palermo-i Egyetem Szervetlen Kémia Tanszékével (Prof. L. Pellerito), a Hamburgi Egyetem Kémiai Tanszékével (Prof. D. Rehder), a Henri Poincaré Egyetem (Nancy) Kémiai Tanszékével (Prof. P. Rubini) és a Fort Collins-i Colorado Egyetem Kémiai Tanszékével (Prof. D. Crans) és a Dunkerque-i Egyetem Kémiai Tanszékével (Prof. A. Aboukais, Dr. S. Bouhsina).

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Tovább folytatódott munkájuk a korábban elnyert OTKA (3) és NKTH (1) projektekben. Sikeresen indult egy Marie-Curie pályázatuk egy fiatal kutató hazatérésével kapcsolatosan.

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

1. Marzano C, Sbovata SM, Bettio F, Michelin RA, Seraglia R, Kiss T, Venzo A, Bertani R: Solution behaviour and biological activity of bisamidine complexes of platinum(II) J. Biol. Inorg. Chem., 12, 477–493 (2007)
2. Kiss T, Odani A: Demonstration of the importance of metal ion speciation in bioactive systems, Bull. Chem. Soc. Jap., 80, 1691–1702 (2007)
3. Kiss T, Gajda T, Gyurcsik B: Bevezetés a bioszervetlen kémiába, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2007 (ISBN: 978-963-19-5999-4)
4. Kiss T, Jakusch T, Hollender D, Dörnyei Á: Biospeciation of insulin-mimetic VO(IV) complexes. Vanadium: The Versatile metal, ACS Symposium Series 974, Ed: Kustin K, Pessoa JC, Grans DC, American Chemical Society, Washington, DC, Chapter 23: 323–339 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport (Társult tag)

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	1
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			4
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			4
<i>Ebből</i> impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	4
nemzetközi együttműködés keretében:	4	SCI által regisztrált folyóiratban:	4
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	4,646	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	235
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			185
<i>Magyarul</i> könyv/monográfia <sup>7</sup> :	1	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	2	posztterek száma:	5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	3	Gyakorlati kurzusok száma:	0
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát:	1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :		PhD-t:	3
			1000
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			0 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	0	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			0
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	10 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt

## SZTE REAKCIÓKINETIKAI KUTATÓCSOPORT (TÁRSULT TAG)

Vezető: Kiss János, az MTA doktora  
6720 Szeged, Dóm tér 7.  
Telefon: (62) 544-803, Fax: (62) 420-678  
e-mail: jkiss@chem.u-szeged.hu

### I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatócsoport tudományos tevékenysége a technológiailag fontos heterogén katalitikus folyamatok és azok elemi lépéseinek a vizsgálatára irányul. A katalitikus modell-reakciók kiválasztásával arra törekednek, hogy új tudományos felismerések mellett a gyakorlat számára is hasznosítható eredményekhez jussanak.

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

A szénhidrogének aromatizációjának vizsgálata után az etanol és metanol aromatizációját vizsgálták. Megállapították, hogy a molibdén-karbid rávitele a savas centrumokat tartalmazó ZSM-5 mintákra megváltoztatja a zeolit katalitikus viselkedését és jelentős mértékben megnöveli az etanolból a különböző aromás vegyületek létrejövetelét. Kimutatták, hogy az aromás vegyületek képződésében döntő lépés az etanol dehidratációjában előálló etilén aktiválása és aromatizációja.

Ezt követően a hidrogén előállítását vizsgálták a  $\text{Mo}_2\text{C}$  alapú katalizátorokon. Megállapították, ha szén-nanocsövet vagy Norit szenet alkalmaznak hordozóként, drámaian megváltozik az alkoholok bomlása: aromás vegyületek képződése helyett a hidrogénné történő bomlás kerül előtérbe. A  $\text{Mo}_2\text{C}$  előnyös tulajdonsága, annak nagy stabilitása, hatásossága összemérhető a drága nemesfémek katalitikus aktivitásával. Az alkoholok és szénhidrogének átalakulásának mechanizmusa megismerése céljából nagy felbontású elektron energiavesztési spektroszkópiát (HREELS) és XPS-t is alkalmaztak. Kimutatták, hogy a metilén 160 K körül  $\pi$ -kötésű etilénné alakul. A kálium adalék elősegíti az alkil fragmentek kapcsolódását.

STM vizsgálatokkal tanulmányozták a  $\text{TiO}_2(110)$  felületen kialakított arany nanoklaszterek sajátságait. Az arany részecskemérete 3-4 nm-nek adódott. Kimutatták, hogy submonoréteges kálium vagy molibdén hozzáadása jelentősen csökkentette az arany méretét 1-2 nm-re. Ezen a felületen CO oxidáció alatt hidrogén jelenlétében 500 K körül ez a paraméter jelentősen növekedett 4-8 nm-re. Ezek az eredmények a technológiailag fontos PROX reakcióban lehetnek hasznosíthatók. Infravörös spektroszkópiával, XPS-el és CO valamint acetonitril adszorpciójával jellemezték az arany mellé felvitt ródium kétfémes nanorendszer struktúráját polikristályos  $\text{TiO}_2$  hordozón. Kimutatták, hogy a ródium stabilizálja az arany szemcseméretét, miközben a ródium feldúsul a felületen.

Kimutatták reflexiós abszorpciós infravörös spektroszkópiával (RAIRS), hogy a  $\text{NO}+\text{CO}$  reakcióban keletkező izocianát átmeneti köztitermék, az amerikai kutatókkal ellentétben, csak 300 K-ig stabilis a Pd(100) felületen. A preadszorbeált oxigén mintegy 100 K-el növelte a felületi izocianát stabilitását.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A tárgyévben „Karbid katalizátorok vizsgálata” címen magyar-argentín TeT pályázatot nyertek el.

A kutatócsoport részt vesz a SZTE oktató munkájában, beleértve PhD hallgatók képzését is. A kutatócsoport vezetője alapító tagja a SZTE Kémiai Doktori Iskolának. Műszerparkjukat a kutatási feladatok elvégzése mellett az egyetem hallgatóinak képzésében is igénybe veszik. A kutatócsoport tagja a KNRET pályázat által támogatott SZTE által koordinált Környezetvédelmi és Nanotechnológiai Tudáscentrumnak.

Szoros tudományos kapcsolatot ápol berlini Frei Universitat Fizika Intézetével, a berlini Fritz-Haber Intézettel és a Cseh Akadémia Fizika Intézetével.

Az MTA és a Román Akadémia kétoldalú egyezményes szerződés keretében kooperációban vagyunk a temesvári Műszaki Egyetemmel.

### IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport 3 OTKA egy OMFB (NKFP) és egy nemzetközi pályázat Tét feladatainak teljesítésén munkálkodott.

- NKTH-OTKA (K 92200) keretében a Cu nanorészecske természetét kezdtük felderíteni.
- NKTH-OMFB (1A748) Hidrogén átalakulása alkoholból.
- OTKA (TO 46351) 2007. dec. 31-én befejeződött, a témavezető irányításával 22 dolgozat született.
- OTKA (TO 46351) Az év végén lezárult, a témavezető irányította témából 22 dolgozat született.
- OTKA (NI 69327) A témavezető és csoportja részt vesz a 2007-ben elnyert pályázaton, melynek témája a szénhidrogének és alkoholok reakciójának vizsgálata.

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

1. Raskó J, Koós Á, Baán K, Kiss J: Characterization of Au-Rh/TiO<sub>2</sub> catalysts by CO adsorption; XPS, FTIR and TPD experiments. React. Kinet. Catal. Lett. 90 187–195 (2007)
2. Németh R, Kiss J, Solymosi F: Surface chemistry of HNCO and NCO on Pd(100) J. Phys. Chem. C 111 1424–1427 (2007)
3. Farkas AP, Solymosi F: Adsorption and reactions of ethanol on Mo<sub>2</sub>C/Mo(100) Surface Science 601 193–200 (2007)
4. Farkas AP, Bugyi L, Koós Á, Solymosi F: Effects of potassium on the reaction pathways of CH<sub>2</sub> fragment over Mo<sub>2</sub>C/Mo(100) Surface Science 601 3736–3739 (2007)
5. Raskó J, Kiss J: Adsorption of acetonitrile and its reaction with oxygen on TiO<sub>2</sub>-supported Au-Rh bimetallic catalysts. React. Kinet. Catal. Lett. 91 149–160 (2007)
6. Berkó A, Majzik Zs, Kiss AM: Low temperature CO oxidation on differently prepared TiO<sub>2</sub>(110) supported Au catalysts. J. of Physics: Conference Series 61 110–114 (2007)
7. Barthos R, Széchenyi A, Koós Á, Solymosi F: The decomposition of ethanol over Mo<sub>2</sub>C/carbon catalysts. Applied Catalysis A: General 327 95–105 (2007)

## VI. A kutatóhely 2007. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Reakciókinetikai Kutatócsoport (Társult tag)

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	0	Ebből kutató <sup>2</sup> :	0
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			13
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			13
Ebből impakt faktoros publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	12
nemzetközi együttműködés keretében:	0	SCI által regisztrált folyóiratban:	12
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	28	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	305
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			191
Magyarul könyv/monográfia <sup>7</sup> :	0	könyvfejezet:	0
Idegen nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	3	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	ebből külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	7	posztterek száma:	2
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			3
Ebből doktori iskolákban oktatók száma:	3	Doktori iskolát vezetőik száma:	0
Elméleti kurzusok száma <sup>13</sup> :	1	Gyakorlati kurzusok száma:	1
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	1
		PhD-t:	4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>14</sup> :			0
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>15</sup> :			0 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>16</sup> :	1	Teljes saját bevétel:	19,5 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma <sup>18</sup> :			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,5 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT témák száma <sup>19</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>20</sup> :			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>21</sup> :			0 MFt



Ez az oldal már nincs!!