

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2010. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

I.

Matematika és természettudományok

Budapest

2011

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

Szarka László főosztályvezető

Gaugecz Janka
Herczeg György
Hegedűs Éva
Kárpáti Mária
Redler László

Idei Miklós

TARTALOMJEGYZÉK

Előszó	5
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések	7

Matematikai és természettudományi kutatóintézetek

Atommagkutató Intézet	11
Földrajztudományi Kutatóintézet	26
Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet	37
Geokémiai Kutatóintézet	48
Izotópkutató Intézet	58
Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet	70
Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet	81
Kémiai Kutatóközpont Nanokémiai és Katalízis Intézet	91
Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézet	102
KFKI Atomenergia Kutatóintézet	113
KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet	125
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet	140
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet	151
Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet	165
Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet	179
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet	194

Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok

BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport	213
BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport	217
BME Fémtechnológiai Kutatócsoport	221
BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport	225
BME Gépek és Jarművek Dinamikája Kutatócsoport	229
BME Irányítástechnikai Kutatócsoport	233
BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport	237
BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport	241
BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport	245
BME Sztochasztika Kutatócsoport	249
BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport	253
DE Homogén Katalízis Kutatócsoport	257
DE Számelméleti Kutatócsoport	261
DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport	265
ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport	269
ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport	273
ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport	277
ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport	281
ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport	285

ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	289
ME Anyagtudományi Kutatócsoport	293
ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport	297
MTM Paleontológiai Kutatócsoport.....	301
PE Levegőkémiai Kutatócsoport.....	305
PPKE-SE Neurobiológiai és Infobionikai Plaszticitás Kutatócsoport	309
SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport	313
SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport	317
SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport.....	321
SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport.....	325
SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport	329
SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport (Társult tag)	333
SZTE Reakciókinetikai Kutatócsoport (Társult tag)	337

ELŐSZÓ

A Magyar Tudományos Akadémia közfeladatokat ellátó kutatóhelyeinek lényegében kettős elvárásnak kell megfelelniük: egyrészt hatékonyak és eredményesnek, másrészt nyomonkövethetőnek, illetve átláthatónak kell lenniük. A tudományos kutatás összetett tevékenység, amelyben összekapcsolódik a szakmai képzettség, a szorgalom, az infrastrukturális háttér, az anyagi ráfordítás, az együttműködés, az intuíció, és végül, de nem utolsósorban kicsit talán a szerencse is. E tényezők mindegyikének komoly szerepe van a tudományos eredmény megszületésében. Nem elegendő maga a tudás, ha a körülmények gátolják kibontakozását, hiába születnek előremutató gondolatok, ha személyi vagy tárgyi feltételek nem teszik lehetővé kibontakozásukat. Az Akadémia kutatóhálózatának, a kutatóhálózatot irányító, koordináló és kiszolgáló szervezetnek az a legfontosabb feladata, és egyben az eredményesség előfeltétele is, hogy biztosítsa a tudományos kutatás számára e tényezők lehetőleg minél teljesebb konstellációját.

A Magyar Tudományos Akadémia évente beszámoltatja kutatóhelyeit tevékenységükről. A Magyar Tudományos Akadémiáról szóló 1994. évi XL. törvény 17. § (7) bekezdésének g) pontja alapján az Akadémiai Kutatóintézetek Tanácsa (AKT) a Közgyűlés elé terjeszti a kutatóhelyek tevékenységéről szóló beszámolót. A Magyar Tudományos Akadémia Alapszabálya (a továbbiakban: Asz.) 44. § (2) bekezdése szerint a főtitkár tevékenységéről, kiemelten a kutatóhálózat működéséről és eredményeiről minden évben beszámol a Közgyűlésnek, amelynek elfogadásáról a Közgyűlés határozatban dönt. Az Asz. 51. § (2) bekezdése alapján az intézetek és a támogatott kutatócsoportok éves jelentésének formáját az AKT a szakbizottságok javaslata alapján hagyja jóvá.

A 2010. évről szóló kutatóintézeti és támogatott kutatócsoporti szakmai beszámolók a 2011. február 28-i határidőig rendben elkészültek. A 2010. esztendő számos területen igazolta az Akadémia létének szükségességét és a társadalom számára végzett munkájának hasznát. Gondoljunk csak a természeti katasztrófák okozta problémák megoldásának tudományos módszereire, az árvízre, a vörösiszap-katasztrófára, de számba vehetjük intézeteink társadalom és gazdaság területén végzett munkájának eredményeit is. Az Akadémia sokat tett megújulásáért is. Második évét töltötte be a „Lendület” program, amelynek célja, hogy iskolateremtő képességű kiválóságokat mozgósítson a hazai tudományos kutatás dinamikus megújítására. Ugyancsak előremutató lépés volt legújabb kutatóintézetünk megalapítása, melynek feladata a Duna kutatása. 2010 legnagyobb nehézsége a pályázati rendszer szükségyszerű átalakításából fakadóan a pénzek zárolása és a pályázati lehetőségek átmeneti megszűnése, ami éppen a korábban legsikeresebben pályázó kutatóhelyeket sújtotta. 2010 folyamán sajnos az intézetek infrastrukturális háttere is tovább romlott.

A kutatóhálózat munkáját bemutató kötetek, a „sárga könyvek” immár hagyományosan a kutatók számadását teszik nyilvánossá. Az olvasó, az érdeklődő és a mecénás egyaránt megismerkedhet az elért eredményekkel, egyszersmind számszerű tájékoztatást is kap az elvégzett munka háttéréről, körülményeiről is; kik, hányan, milyen forrásokból, milyen hazai és nemzetközi együttműködéssel, mit alkottak, mit tettek le az ország és a világ asztalára. A beszámoló világos, jól látható mércét állít tudósaink számára. Nyomon követhetők intézményeink sikerei, gondjai, munkájuk jövőre tekintő tervei. Ajánlom e kötetet mindenkinek, aki a maga valóságában szeretne megismerkedni kutatóhálózatunk elmúlt évi tevékenységével.

Budapest, 2011. április 11.

Németh Tamás

A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

A táblázatban szereplő adatok többségét az intézetek vagy a csoportok adták meg, az intézetek pénzügyi és létszámadatait pedig a Pénzügyi Főosztály szolgáltatta a pénzügyi beszámolók alapján. Többéves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg került feltüntetésre forintban.

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

¹ Az éves gazdasági beszámolóban szereplő átlagos statisztikai állományi létszám.

² A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2010. évi tényleges átlagléttszáma. Az átlagléttszámba beletartoznak a részmunkaidőben foglalkoztatottak is. Ezekben az esetekben a részmunkaidősök létszáma a ledolgozott órák alapján lett teljes munkaidős létszámmá átszámítva.

³ Itt külön megadtuk tájékoztatásul azoknak az akadémikusoknak a tényleges számát, akik az intézettel munkaviszonyban nem állnak, de tudományos tevékenységük kapcsolatban áll az intézet tevékenységével.

⁴ Az MTA keretéből fiatal kutatói státuszban levők nélkül.

⁵ A publikációk közé soroltuk mindazon tudományos és tudományos ismeretterjesztő publikációkat, amelyeket a kutatóhely statisztikai állományi létszámba besorolt munkatársai jelentettek meg a beszámolási évben, és a publikáción szerepel a kutatóhely neve. Az egyes publikációtípusok meghatározásánál az MTMT definícióit vettük alapul.

⁶ Tudományos publikációk alatt értjük azokat az új tudományos eredményeket vagy meglévő eredményeket tudományos igénnyel feldolgozó írásműveket, amelyek ellenőrzött formában hozzáférhetővé váltak a tudományos közösség számára az adott tudományterület írott és íratlan normáinak megfelelő színvonalon és kivitelben tartós adathordozón (pl. nyomtatott forma, nem magánjelleggel létrehozott weblap).

⁷ Új kutatási eredményeket vagy kísérleteket leíró tudományos dolgozat, amely a) eredeti elméleti vagy empirikus kutatási eredményről számol be, az adott tudományterület elfogadott módszereit használja, a tudományos közösségnek szól; b) a vizsgált tudományterület eredményeinek összefoglalását, szintézisét nyújtja és új kutatási területeket, irányokat jelöl ki; c) a szakirodalomban való eligazodást, tartalomfeltárást szolgálja; d) ide számítjuk a térképeket is.

⁸ Általában 48 oldal terjedelmet meghaladó, szöveget, illusztrációt tartalmazó, önálló kiadványszerű megjelentetett tudományos mű. Idetartoznak a monográfiák, egy-egy témát összefoglaló jelleggel bemutató kötetek. Dokumentumhordozó tekintetében lehet nyomtatott papír alapú (ekkor ISBN számmal rendelkezik) vagy elektronikus formátumú, amely nem magánjelleggel létrehozott honlapon, internetes elérhetőséggel rendelkezik. A meg nem jelentetett, csak a doktori eljárás által előírt példányszámban készült disszertáció nem tartozik ide.

⁹ Könyvrész, könyvfejezet (tanulmánykötetben megjelent tanulmány): egységes tematikájú könyv vagy tanulmánykötet részeként megjelenő, szerzővel, címmel, meghatározható terjedelemmel rendelkező, illetve önálló, kisebb egységként leírható (rész, fejezet) publikációs forma.

¹⁰ A folyóiratok 2009. évi impakt faktorait használtuk.

¹¹ A kutatóhely állományában lévő kutatók 2010-ben kapott hivatkozásainak száma az MTMT számára leadott listák alapján. A bibliográfiai adatként szereplő művek száma itt nem szerepel.

¹² A tárgyévben kiállított oklevelek alapján.

¹³ Nemzeti úton megadott oltalmak: szabadalom, formatervezési minta, használati minta, védjegy, földrajzi árujelző, növényfajta-oltalom, kiegészítő oltalmi tanúsítvány.

¹⁴ Megadott külföldi oltalmak: hatályosított európai szabadalom, közösségi védjegy, nemzetközi, Madridi Megállapodás szerinti védjegy, közösségi növényfajta-oltalom.

¹⁵ Azokat az előadásokat és poszttereket is ideszámítottuk, amelyek konferencia kiadványban nem jelentek meg, de dokumentálhatók.

¹⁶ Itt csak a kormány szintű vagy ezzel ekvivalens országos és nemzetközi, nem megbízási díjért végzett szakpolitikai tanácsadó tevékenységet, bizottsági részvételt soroltuk fel.

¹⁷ 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 2009/2010-es tanév második és a 2010/2011-es tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

¹⁸ A 2010. 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,
 - pályázati programok támogatása
- összegével.

¹⁹ 2010-ben az MTA keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyek száma.

MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZETEK

ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET

4026 Debrecen, Bem tér 18/c, 4001 Debrecen, Pf. 51.
telefon: 52-509 200; fax: 52-416 181
e-mail: director@atomki.hu; honlap: <http://www.atomki.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézet fő feladatai az alapító okiratban foglaltak szerint a következők: alap- és alkalmazott kutatások folytatása az atommagfizikában, az atomfizikában és a részecskefizikában. Fizikai ismeretek és módszerek alkalmazása más tudományágakban (anyagtudomány és anyagvizsgálat, földtudományok és környezetkutatás, orvosi-biológiai kutatások) és a gyakorlatban. Az alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése. Közreműködés a posztgraduális képzésben és a felsőoktatás feladatainak ellátásában. Az alaptevékenységgel azonos területen kiegészítő tevékenység végzése.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Kvantumfizika

A Bell-egyenlőtlenségek a természet bizarr, nemlokális természetét mutatják ki. Ezért fontos, hogy minél pontosabban, a kísérlet során előforduló technikai kibúvóktól mentesen lehessen érvényességüket kísérletileg igazolni. Két kibúvó van, amelyeket külön-külön kísérletileg sikerült már kizárni, de egy kísérleten belül a kettőt még nem. Az egyik oka, hogy az összefonódott fotonpáron végzett mérések során a fotondetektorok nem tökéletes hatékonyságúak. Az intézet kutatói kimutatták, hogy az aszimmetrikus esetben (amikor csak az egyik detektor 100%-os hatékonyságú) létezik olyan N-méréses Bell-egyenlőtlenségcsalád, melynek tagjaira N-dimenziós rendszerek esetén $1/N$ -hez nagyon közeli fotondetektor-hatékonysággal is Bell-sértést érhetünk el; ugyanakkor a szimmetrikus Bell-kísérletben egy pár 4-dimenziós kvantumrendszer segítségével a detektorok hatékonyságának küszöbértékét 61,8%-ra sikerült lecsökkenteni. Ezen Bell-egyenlőtlenségek az eszközfüggetlen kvantumkulcsokat előállító protokollok szempontjából is fontosak.

A magyszerkezet egyik örökzöld kérdése az, hogy az atommagok milyen mértékben fűrtösödnek, vagy mennyire tisztán maradnak meg héjmodell-szerkezetűnek. Mind a héj-, mind a fűrtmodell teljes bázissal rendelkezik, ezért bármely magállapotot kifejthetünk mindkettő szerint. Azok az esetek, ahol mindkét kifejtés bonyolult, a véges maganyag különböző fázisainak (és szimmetriáinak) felelnek meg. Kutatásaik során ezt vizsgálták, mikroszkopikus módszerek alkalmazásával, a ^{20}Ne és ^{24}Mg atommagok alapsávhoz tartozó állapotaira nézve. A „ ^{16}O +alfa-részecske(k)” állapotot egy folytonos paraméter változtatásával „ ^{16}O +nukleonok” típusú állapotba tudták átvinni. Az átmenet fizikai oka a spinpálya-kölcsönhatás változó erőssége. Azt találták, hogy mindkét esetben az ún. héjmodellszerű fűrtösödés, vagyis az SU(3) szimmetria valósul meg.

Összehasonlító elemzést végeztek három egzaktul megoldható PT-szimmetrikus potenciál aszimptotikus viselkedésére. E téma jelentősége, hogy hosszú, intenzív elméleti munka után 2010-ben igazolódott először kísérletileg a PT-szimmetria megvalósulása konkrét fizikai rendszerekben, beleértve annak elméletileg megjósolt spontán sérülését is. A kísérleti elrendezés olyan hullámvezetőkből állt, amelyeknek a PT-szimmetria által meghatározott emisszív és abszorptív tartományai is voltak. Ezek véges méretűek, ezért érdemes egzaktul megoldható példákon tanulmányozni hasonló elrendezésű rendszereket. Kimutatták, hogy bár

a PT-szimmetrikus Scarf II és Rosen-Morse II potenciálok valós komponense megegyezik, aszimptotikusan eltérő képzetes komponensük miatt alapvetően másként viselkednek. A Rosen-Morse II esetében pl. a PT-szimmetria spontán sérülése egyáltalán nem következik be. A Scarf II potenciál ezzel szemben szinte minden tulajdonságában hasonló viselkedést mutatott a tőle igen eltérő jellegű PT-szimmetrikus Coulomb-potenciállal.

Az atommagok tömege, vagy az ezzel ekvivalens kötési energia fontos alappennyiség. Tömegmérésekkel tanulmányozhatjuk pl. az elhullatási vonalak környékén bekövetkező héjszerkezet-változást. A globális magtömegszámítások egyik módszere a Sztrutyinszkij féle mikroszkopikus-makroszkopikus modell. Alkalmazhatósága az ún. görbületkorrekciós eljárás hatékonyságától függ. Kutatóik két új görbületkorrekciós módszert fejlesztettek ki, és a hagyományos, polinomiális módszert is megjavították véges hatótávolságú súlyfüggvény bevezetésével. Az új módszerek stabilabbak, és jól alkalmazhatók a stabilitási sávtól távoli, valamint könnyű magokra is.

Részecskefizika

2010. januártól kezdve folyamatosan működtették a CMS-müonkamrák helyzetmeghatározó rendszerét. Több, mint 3000 mérési ciklust teljesítettek, valamint két szervezett mérési kampányban vettek részt (áprilisban és +novemberben). Kidolgozták a CMS pixeldetektorának időzítését. Hozzájárultak a CERN CMS detektorán belüli hőmérséklet és páratartalom mérésére alkalmas mérőrendszer fejlesztéséhez. Tanulmányozták a szuperszimmetrikus részecskék keresését szolgáló eseménylválogató vágásokat.

A hadronsugár-hatáskeresztmetszetek pontos számításához szükséges második kvantumszín-dinamikai sugárzási korrekciók meghatározását lehetővé tévő általános módszer fejlesztése során sikerült integrálniuk az iterált egyszeresen feloldatlan partonsugárzást leíró közelítő mátrixelemeket a két feloldatlan parton fázissterén.

Összehasonlították a kompakt, valamint nemkompakt tereken definiált kétdimenziós, multi-frekvenciás sine-Gordon (SG) modellek fázisdiagramjait. Megmutatták, hogy a kompakt és nemkompakt modellek nagyenergiás viselkedése megegyezik, de az alacsonyenergiás eltér. Így a kompaktság nem befolyásolja a kritikus frekvenciát, amelynél az SG-modell topológikus fázisátalakulást szenved, hiszen azt a nagyenergiás skálatörvények határozzák meg.

Magfizikai alapkutató

Az intézet kutatói megvizsgálták a különböző hasadási termékek β -erősségeloszlásait, melyek jelentős szerepet játszanak az atomreaktorok reaktorhőjének kialakulásában. A teljes γ -abszorpciós detektálási módszer, az IGISOL-technika, és a JYFLTRAP Penning-csapda együttes alkalmazásával először sikerült feloldaniuk a ^{239}Pu -fűtőanyag kísérleti és elméleti reaktorhője között régóta fennálló ellentmondást. Az atomreaktorokban termelt teljes energia közel 30-40 %-a ^{239}Pu -tól származik.

Az intézet kutatói az ^{230}U és ^{232}U atommagok tetraédres szimmetriájú, piramisszerű alakjára kerestek adatokat. Az atommagokat a kísérlet során $(\alpha,4n)$ és $(\alpha,6n)$ reakciókkal gerjesztették, és a keletkezett γ -sugárzás méréséből azt kapták, hogy a kérdéses sávra inkább oktupól vibráción alapuló szerkezet valószínűsíthető, nem pedig a keresett tetrahedrális magalak.

Először demonstrálták kísérletileg, hogy a relativisztikus (1 AGeV) ^{238}U nyaláb fragmentációjakor keletkező ^{192}Pb $J\pi = 12+$ izomer állapota kellően irányított (spin-alignment), és ez az irányítottság megmarad a radioaktív nyaláb szeparációja után is. Ez lehetővé teszi az állapot g-faktorának meghatározását. Az így meghatározott g-faktor jól egyezik a korábbi értékekkel.

A ^{234}Pa atommag igazi hármás hasadására vonatkozó első kísérleti eredményeket publikáltak az intézet kutatói. A detektorok elhelyezésétől is függő hármás hasadás hozama $\approx 10\text{-}5$ -nek adódott a normál hasadás hozamához képest. A legkönnyebb hasadási termék tömege pedig 20-40 a.m.u volt. Tárgyalják a megfigyelt jelenség és a klaszterbomlás kapcsolatát is.

A GANIL francia nemzeti nehézion-laboratóriumban a mágikus számú neutron tartalmazó ^{44}S atommagot nemzetközi együttműködésben vizsgálták. A magban egy 2,6 μs -os izomer állapotot találtak, amelynek e^- és γ -bomlási sajátságából meghatározták az állapot impulzuszóráját és deformációját. A kísérlet alapján megmutatták, hogy ezen mag alapállapotában megszűnik az $N=28$ héjazáródás hatása, mert felcserélődik a normál és intruder állapotok sorrendje: az alapállapot lesz deformált, a normál, gömbszerű állapot pedig gerjesztett.

A ^{36}S és ^{208}Pb mélyen rugalmatlan ütközésében keletkező könnyű fragmensek szerkezetének a legnaro laboratóriumban (Olaszországban) végzett vizsgálata során a mágikus neutronszámú ^{33}Si -ban neutron intruder állapotokat mutattak ki, a ^{38}Cl -ban a proton törzs gerjesztésére találtak bizonyítékot, a ^{40}S -ben pedig az yrast állapotok energiáját határozták meg.

Az EUROBALL-IV detektorrendszerrel végzett mérés adataiból meghatározták a ^{190}Hg szuperdeformált állapotainak az energiáját és spinjét, s ezáltal a magbéli kötési energiákat szuperdeformáció esetén. A kétproton-szeparációs energiákat a szuperdeformált állapotokban nagyobbak találták, mint a normáldéformált állapotokban. Ez a nem várt eredmény csak a kollektív kvadrupól módusokat is figyelembe vevő modellszámításokban reprodukálható.

A dél-afrikai iThemba LABS intézetben a ^6Be bomlását tanulmányozták a szétrepülő „break-up” részecskék energiájának és szögeloszlásának mérésével. A részecskék típusának és energiájának az Atomkiban készült detektorokkal történő egyidejű mérésére egy nagy helyzetérzékenységgű detektorrendszert használtak. A kapott adatokat 3-test rezonanciákra és 2-test szekvenciális bomlásokra vonatkozó számolásokkal összevetve elsőként mutatták ki, hogy a $2+$ állapot tiszta 3-test szerkezet, az e feletti állapotokat pedig 2-test bomlások jellemzik.

Az AFRODITE gammadetektor-rendszerrel megvizsgálták a $^{152,154,155}\text{Gd}$ nem-yrast, közepes-spinű állapotait. Azt találták, hogy a ^{152}Gd -ban és a ^{154}Gd -ban a második 0^+ állapotra épülő sáv, amit korábban béta sávként azonosítottak, nem mutatja a béta sáv várt tulajdonságait. A 0^{+2} állapot egy második kvázirészecske-vákuum állapotként értelmezhető, amely saját gamma- és okkupól sávval rendelkezik. Ez az eredmény ellentmond a deformált atommagok második 0^+ állapotára vonatkozó, korábban általánosan elfogadott interpretációnak.

Megmérték a $^{151}\text{Eu}(\alpha,\gamma)^{155}\text{Tb}$ és $^{151}\text{Eu}(\alpha,n)^{154}\text{Tb}$ reakciók alacsony energiás hatáskeresztmetszetét. Az eredmények alapján javasolták az asztrofizikai p-folyamat számításokban a megfelelő reakciósebességek kettes faktorról való csökkentését.

A csillagok hidrogénégése MgAl ciklusában kulcsszerepet játszó $^{25}\text{Mg}(p,\gamma)^{26}\text{Al}$ reakcióban három asztrofizikai jelentőségű alacsony energiás rezonancia erősségét mérték meg a korábbinál nagyobb pontossággal.

Rugalmas alfa-szórás adatokból teljes reakció-hatáskeresztmetszeteket határoztak meg Coulomb-gát körüli energiákon. Nagy pontosságú mérésekkel mintegy két nagyságrenddel csökkentették a $^{133\text{m}}\text{Ce}$ mag felezési idejének hibáját.

Mindkét stabil nitrogén izotóp protonbefogási hatáskeresztmetszetét mérték, és az eredményekből R-mátrix analízis segítségével extrapoláltak az asztrofizikai energiatartományra.

A „trójai faló” indirekt módszer segítségével asztrofizikai jelentőségű alacsony energiás rezonanciák erősségét határozták meg a $^{17}\text{O}(p,\alpha)^{14}\text{N}$ reakcióban.

Összegyűjtötték és kritikailag kiértékelték az A=50 tömegszámhoz tartozó összes ismert atommag szerkezetére vonatkozó új kísérleti adatokat. Az elemzés eredményeként minden atommag esetén összeállították az elfogadott adatok listáját. Az összegyűjtött, illetve az elfogadott adatokat az ENSDF internetes adatbázisban publikálták. A kiértékelő munkát elkezdték az A=129 tömegszámra is.

Magfizikai alkalmazások

Elsőként határozták meg nanoporozus alumíniumoxid minta nanokapillárisainak irányeloszlását iontranszmissziós mikroszkópia segítségével. Diffrakciós rácsokat és mikro Fresnel lencsákat terveztek és készítettek protonnyalábos írásos technikával poli(dimetilsziloxán) polimerben (PDMS), majd vizsgálták az eszközök működését.

Az 1993-2010 közötti időszakra megállapították a kelet-magyarországi régióra jellemző légköri aeroszol összetételének és forrásainak hosszú távú tendenciáit és szezonális változásait. Az eddig ismeretlen eredetű Cl-tartalmú aeroszoknak 5 különböző forrását sikerült azonosítani. Megállapították, hogy a forgalmas utak mellett fekvő iskolákban és óvodákban magasabb volt a szálló por koncentrációja a WHO által javasolt egészségügyi határértékeknél.

Meghatározták a Vásárosnamény környékéről vett artéri üledékek elemi összetételét ED-XRF, PIXE, F-AAS módszerekkel, e mellett vizsgálták a megemelkedett nehézfém-koncentráció növényvilágra gyakorolt esetleges toxikus hatását Sinapis Alba teszttel.

A Charisma EU FP7 I3 projekt keretében 2010 folyamán 7 külföldi kutatócsoportot fogadtak Európa különböző országaiból, és végeztek méréseket a vendégkutatók számára az Atomki pásztázó nukleáris mikroszondáján muzeológia és kulturális örökség megőrzése témakörében.

Az Aquincumi Múzeummal együttműködésben elsőként vizsgálták meg egy aquincumi millefiori (sokszínű) régészeti üvegleletet SEM-EDX és micro-PIXE analitikai módszerekkel. Sikerült kimutatni a római és mezopotámiai üvegtészési technikák együttes alkalmazását.

Megállapították, hogy a fényvédő kozmetikumok ZnO nanorészecskéi in vivo nem jutnak át az atópiás dermatitisz által érintett bőrön.

Mérési módszert dolgoztak ki szerves vékonyminták besugárzás hatására létrejövő hidrogénfogyásának, és így a molekulaszervezet károsodásának a real-time követésére. A módszerre alapozva meghatározták a kapton és mylar fóliák sugárzástűrését.

Kifejlesztettek egy olyan mérési elrendezést, amellyel szimultán lehet RBS-, ERDA- és PIXE-méréseket végezni fókuszált ionnyalábbal. Ezáltal mikroszkopikus szinten lehetővé vált egy minta mélységi és térbeli elemeloszlásának kvantitatív meghatározása $Z \geq 1$ elemekre.

Dél-afrikai együttműködésben megoldották a ^{103}Pd termo-kromatográfiás elválasztását ródiom céltárgyból. Indiai kutatókkal közösen szelén vizsgálatát kezdték el magyarországi talaj- és növénymintákban. A Debreceni Egyetemen együttműködve pedig napraforgó- és kukoricakultúrák szelénfelvételét tanulmányozták.

A paksi atomerőmű radioaktív hulladékaiban előforduló, nehezen mérhető, béta-sugárzó ^{36}Cl radioizotóp radiokémiai mérésére dolgoztak ki új módszert ICP-MS alkalmazásával.

Cu- és Cr-módosított SBA-15 mezopórusos szilikát katalitikus tulajdonságát tanulmányozták ^{11}C -radioizotóppal jelzett metanol reagens konverziójával. Az eddig alkalmazott módszerüket továbbfejlesztett formában alkalmazták, hogy információt nyerjenek a gyenge és erős kötések számáról és mértékéről a katalizátor felületén.

Ir radioizotópok előállításának körülményeit vizsgálták dúsított ^{192}Os céltárgyon végbemenő protonindukált magreakciók segítségével. A radioizotópokat előállító magreakciók hatáskeresztmetszet-adatainak mérését az $E_p < 66$ MeV energiatartományban nemzetközi együttműködés keretében végezték (iThemba, Dél-Afrika).

Izotópok orvosi alkalmazására nemzetközi együttműködésben adatokat kaptak a $^{114\text{m}}\text{In}$, ^{167}Tm , ^{177}Lu , ^{131}Cs , $^{117\text{m}}\text{Sn}$ terápiás, és a ^{123}I , $^{113\text{m}}\text{In}$, ^{111}In diagnosztikai izotópok előállítására.

Adatbázist készítettek a NAÜ részére a vékonyréteg-aktivációs technikában leggyakrabban használt töltött részecske-indukált magreakciók gerjesztési függvényeire és azok alkalmazására besugárzások tervezéséhez, valamint deuteronindukált magreakciók aktivációs hatáskeresztmetszeteire a nemzetközi termionukleáris kísérleti reaktor (ITER) programmal kapcsolatos fúziósanyag-besugárzó berendezés (IFMIF) tervezéséhez és működéséhez.

Ipari és biológiai folyamatok vizsgálatának területén a ^{133}Ba radioizotóp előállításának körülményeit vizsgálták protonokkal Cs céltárgyon végbemenő magreakciók segítségével.

Monte Carlo-szimulációk és kísérletek útján pontosították egy NE-213 folyadékszintillátoros neutrondetektorra az energiafeloldás neutronenergiától való függésére vonatkozó korábbi leírást $E_n \leq 18$ MeV neutronenergiákra.

Neutronreflexiók mérésekkel igazolták, hogy a saját fejlesztésű epitermikus neutron-analizátor (ETNA) alkalmasabb a plasztik robbanóanyagok, repülőtéren csomagok és konténerek ellenőrzésére, mint a termikus neutronokat alkalmazó detektor rendszerek.

Klasszikus molekuladinamikai módszerrel szimulálták az atomkilökődési kaszkádok psec skálán végbemenő időbeli, térbeli fejlődését berillium kristálynál (hcp-Be) és $E_{PKA} \leq 80$ eV atomkilökődési energiáknál.

Az osztrák AC2T intézettel a kopás, a korrózió és erózió radioizotópos vizsgálatát szabad forgalmi határ alatti aktivitásokkal sikerült megvalósítani. Új izotópokat fejlesztettek ki az Fe, Cu alapanyagokat nem tartalmazó minták vizsgálatához, valamint német kutatókkal közösen kidolgozták az Sb-120m izotóp használatát ónt tartalmazó alapanyag méréséhez.

Megkezdődött a PHARMATOM projekt keretében a gyógyszerkutatói feladatokat megvalósító radiokémiai labor felújítása és felszerelése.

Atomfizikai alap kutatás

100 keV-es $\text{He}^{2+} + \text{He}$ ütközésben vizsgálták a kétszeres ionizáció jelenségét. A folytonosan torzított hullámú közelítésben elvégzett számítások szerint az emittált elektronok energia- és szögeloszlásának kialakulásában a végállapotú elektronkorreláció játssza a fő szerepet. Vizsgálták a lövedékion folytonos energiájú állapotaiba történő elektronbefogódás, az ún. kételektronos cusp folyamatát is, melyet korábban az Atomkiban sikerült kísérletileg kimutatni. Végül, 75 keV-es $p + \text{H}$ ütközésben vizsgálták a háromtest szétesési (breakup) folyamat dinamikáját. A klasszikus pályaszámításos Monte Carlo (CTMC) módszerrel elvégzett analízissel az irodalomban nemrég közölt mérési adatokat értelmezték.

Többszörösen differenciális hatáskeresztmetszeteket számoltak klasszikus (CTMC) és kvantummechanikai közelítésben antiproton és hélium atomok ütközésében az ún. anti-cusp elméleti kimutatására. Igen kis energiájú (2-11 keV) antiprotonok és hidrogénmolekula ütközésében elsőként mértek ionizációs hatáskeresztmetszeteket. Azt a meglepő eredményt kapták, hogy kis antiproton energiáknál a hatáskeresztmetszet a lövedék sebességével arányos.

A University College London (London) Fizikai Tanszékén folytatták annak a mérőrendszernek a kifejlesztését, amellyel pozitron-atom ütközésekben a meglökött céltárgy-atommag

energia- és szögeloszlását tervezik meghatározni. Molekuláris ütközések vizsgálatára alkalmas új mérőhelyet terveztek és építettek Debrecenben a VDG-5 nyalábsatorniján.

Elméletileg tanulmányozták a $C^{2+} + HF \rightarrow C^+ + HF^+$ és $H^+ + CH \rightarrow H + CH^+$ töltés-kicserélődési reakciókat. Kimutatták, hogy a folyamatok hatáskeresztmetszete erősen függ az ion–molekula orientációtól. A $H^+ + CH$ ütközés esetében azt kapták, hogy a Franck-Condon közelítés, és a rotációs és vibrációs effektusokat pontosabban leíró "sudden approximáció" hasonló töltés-kicserélődési hatáskeresztmetszeteket ad. A vizsgálatok az indirekt sugárkárosodási folyamatok jobb megértését segítik, hasznosulásuk a sugárterápiában várható. Ugyancsak ebből a szempontból jelentős, hogy H⁻-ionokat sikerült azonosítani a néhány keV energiájú $OH^+ + Ar$ és $OH^+ + CH_3COCH_3$ ütközések fragmentumainak mérése során.

Hidrogénatom, valamint vízmolekula ionizációját vizsgálták lineárisan polarizált lézertérben többféle elméleti közelítésben. A klasszikus CTMC, a QM-erőstér és a Coulomb-Volkov közelítések eredményeit az időfüggő Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásával vetették össze.

Méréseket végeztek az elektron-ciklotronrezonanciás (ECR) ionforrás plazmájából kilépő elektromágneses sugárzás látható fény és röntgen tartományaiban. A nagyfelbontású fotók egymással és számítógépes szimulációkkal való összevetéséből értékes információkat kaptak a plazma elektronkomponenséről és az ionok csapdázásáról. Az ECR ionforrás működési tartományát kiterjesztették nagyintenzitású negatív H, O, OH és C₆₀ ionnyalábokra.

Kr 4p fotoelektronok szögeloszlását mérték és vizsgálták elméletileg olyan fotonenergia-tartományban, ahol a 3d elektronok rezonáns gerjesztése is lejátszódik. A kísérleti és elméleti dipól anizotrópiaparaméterek eltérő fotonenergia-függéséből a direkt ionizáció és a rezonánsan gerjesztett Auger bomlási folyamat közötti interferencia fellépésére következtettek. Elsőként mutattak ki kísérletileg ilyen interferenciát elektromos kvadrupól (E2) kölcsönhatásban.

Az Atomki ECR ionforrásánál mérték polietilén-teraftalát (PET) fóliában kialakított 200 és 400 nm-es kapillárisokon átjutott 3 keV-es Ar⁷⁺ ionok és az azokból semlegesítődés során keletkezett atomok szögeloszlását az idő függvényében. Az atomokra ez az első részletes vizsgálat. Korábbi kísérletekkel megegyezően szögeloszlásbeli oszcillációkat tapasztaltak az ionok kapillárisirányába történő terelődése során. Az atomoknál gyengébb, és fázisban eltérő oszcillációt találtak. Ezek alapján elemezték a semlegesítődés folyamatát.

Nemzetközi együttműködés keretében a Hollandiai KVI Zernike LEIF laboratóriumban Ne⁷⁺ ionok terelését vizsgálták a 100-400 nm tartományban különböző átmérőjű PET és polikarbonát fóliákban kialakított kapillárisokban. A két anyag ionterelési tulajdonságaiban nagy különbségeket figyeltek meg. Polikarbonát anyagnál a kapillárisok elzáródását is észlelték.

Elsőként mutatták meg kísérletileg, hogy makroszkópikus átmérőjű kapillárisok képesek a néhány száz elektronvoltage elektronok jelentősebb energiavesztés nélküli átvezetésére, még akkor is, amikor ezt a geometriai feltételek egyébként nem engednék meg.

Atomfizikai és szilárdtestfizikai alkalmazások, felületkutatás

Többfalú szén nanocső (MWCNT) hordozókra felvitt Pd és Pd-Au ötvözet nanokatalizátor felületeket különböző kezeléseknek (redukálás és hevítés) vetettek alá, majd elektronspektroszkópiai módszerekkel tanulmányozták őket. A felületi analízis megmutatta, hogy a vizsgált Pd/MWCNT katalizátorok nagyban eltérő katalitikus aktivitása a redukálás, illetve a hevítés után a PdO/Pd nanorészecskéket borító amorf szénrétegnek tulajdonítható és a PdO réteg vastagsága nagyobb az inaktív katalizátor esetében.

Az élő és élettelen anyag kapcsolatának vizsgálata céljából alacsony energiájú (50-100 eV) fullerén (C_{60}) ionnyalábbal fémek és szigetelők felületét vonták be, amelyeken (orvosokkal való együttműködésben) élő sejteket növesztettek. Komolyabb ráfordítás esetén a kutatás néhány éven belül szabadalmi, esetleg termékkészítési fázisig is eljuthatna.

3d átmeneti fémekből (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) szinkrotronsugárázással keltett 1s fotoelektron-spektrumokat mértek, és a spektrumok analízisével és szimulációjával, valamint ab initio számolásokkal elsőként mutatták ki, hogy a shake-up gerjesztésre utaló szatellit jelen van minden vizsgált átmeneti fém 1s spektrumában.

Hengeres szimmetriájú Al nanorudakban keltett elektron-lyuk pár által indukált plazmonok gerjesztési mechanizmusát vizsgálták a dielektromosfüggvény-közelítésben. Azt az eredményt kapták, hogy a lyuk jelenléte jelentősen hozzájárul a felületi plazmonok gerjesztésének teljes valószínűségéhez, és hogy az elektron és a lyuk felületi plazmon gerjesztési folyamatai, az intrinsic-extrinsic, vagy a háromlépcsős modelltől eltérően, nem tekinthetők függetleneknek.

Kiterjedt Monte Carlo-számítások segítségével gyors atomok és Al-felület kölcsönhatását tanulmányozták az atomok felülethez képest súrló beesése mellett. Ezen speciális geometria esetében tesztelték az atom–felület közötti kölcsönhatási potenciált.

Ionporlasztással, elektrokémiai módszerrel, valamint kémiai gőzfázisú rétegleválasztással (CVD) előállított néhány 10 nm-től néhány 100 nm-ig terjedő vastagságú vékonyfilmszerkezeteket vizsgáltak szekunder semleges részecskét használó tömegspektrometriai (SNMS) módszerrel. Meghatározták a mélységi feloldás felületi durvaságtól való függését, továbbá az ionporlasztás hatását a felületi durvaságra. Kísérleti eredményeik modellezésével sikerült bebizonyítani, hogy az SNMS-módszernél lényegében a porlasztással kialakított kráter alakja és a vizsgált minta felületi durvasága képezik a mélységfeloldást meghatározó tényezőket. Elektrokémiai leválasztással készült FeCoNi ötvözetek vizsgálatából megállapították, hogyan változik a kialakuló rétegben az elemösszetétel a preferenciális kémiai leválás miatt a leválási folyamat kezdetén, az első néhány nanométeres vastagságban. Ionporlasztással és CVD-vel készített vékonyfilmekben a termikus diffúziós folyamatokat vizsgálták. Az SNMS-módszert napelemek szerkezetkutatásában is alkalmazták.

Elektrokémiai rétegleválasztásos technikával előállított ferromágneses-szupravezető rétegszerkezetek elektronvezetési mechanizmusát vizsgálták alacsony hőmérsékleteken a hőmérséklet és az elemösszetétel függvényében. Bár a jelenség már régóta ismert, az elektrokémiai rétegleválasztásos technikával előállított filmekben történt mérések újnak számítanak a szakirodalomban. A filmek analízise a kémiai összetétel és a felület minőségének meghatározása céljából az SNMS-technika alkalmazásával történt.

A hyperthermia-terápiás módszerek témaköréhez kapcsolódva elméletileg vizsgálták egy mágneses nanorészecske Néel-disszipációs mechanizmussal vizes oldatban történő energiatermelésének hatékonyságát. Az eredmények kísérleti ellenőrzése folyamatban van.

Nanoporokat állítottak elő nagyenergiájú mechanikai őrléssel a 20-100 nm tartományban. XRD-módszerrel meghatározták a porok kristályszerkezetét és méreteloszlását. Cu_6PS_5I szuperionos kristályból kompozitokat és kerámiákat készítettek, és azok fizikai tulajdonságait vizsgálták (együttműködés a Debreceni Egyetemen és az Ungvári Egyetemen). GSO és LSO szcintillátor kristályoknál a szcintilláció szemcseméret-függését tanulmányozták.

A Debreceni Egyetem vékonyfilm-laboratóriumában porlasztással készült sokféle multiréteg (pl. In/SnO, Ni/Pd, Ag/Pd, Ni/Si $As_{20}Se_{80}/AlSiO_5$) szerkezetét határozták meg XRD-technikával. A Ni/Si rendszeren végzett hőkezelésekkel az SNMS-módszerrel azonosított nanoskálájú határrétegben különböző Ni-Si-fázisok jelenlétét mutatták ki XRD-vizsgálatokkal.

Hazai múzeumok gyűjteményeiből származó régészeti leleteken XRF-vizsgálatokat végeztek, így pl. féMLELETEKET ANALÍZÁLTAK A JÓSA ANDRÁS MÚZEUM RÉSZÉRE.

Környezetfizika

Megtörtént az antarktiszi minták K/Ar kormeghatározásra történő előkészítése és az analitikai munka elvégzése. Intruzív magmatismus komplex vizsgálatát végezték el a Kárpát-Pannon Régióban. Új, a K-Ar kort befolyásoló effektust fedeztek fel leucittartalmú bazalton, módszert találtak a hiba felismerésére és korrekciójára. A Cseh Masszívum harmadidőszaki vulkáni fázisaira kidolgozott kronológiát pontosították. Megvizsgálták a növényzet és trágyázás hatását a talaj agyagásványainak K-Ar korára, így a K-Ar kormeghatározás szerepehez juthat, mint talajdiagnosztikai módszer. Kisfokú metamorfitek kronológiáját határozták meg szlavóniai (Horvátország) kőzeteken.

Bevezették a rutinszerű mérési gyakorlatba az Atomkiban kifejlesztett új típusú, CO₂-gázabszorpción alapuló folyadékszcintillációs C-14 mérést, és száz-as nagyságrendű mérést végeztek. Világviszonylatban is új típusú AMS minta-előkészítési módszert dolgoztak ki a svájci ETHZ intézettel együttműködésben a kismennyiségű (széntartalom kisebb, mint 0,1 mg/minta) karbonátok és mélységi rétegvíz mérésére. Megtörtént a zártcsöves grafitizációs AMS céltárgy-előállítási módszer adaptálása, optimalizálása, átfogó tesztje, és a módszer rutinszerű laboratóriumi gyakorlatba vezetése az Atomkiban. A légköri fosszilis CO₂ tartalom közvetlen fizikai mérését végezték el Debrecen városában a 2009-2010 években.

Nagytisztaságú ⁴He-es izotóphígítást vezettek be a trícium bomlásából származó ³He tömegspektrométeres mérésének pontosítása céljából. Kilencéves, 585 csapadékminta stabilizotóp-összetételének ($\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$) kiértékelését és a hazai csapadékvonal meghatározását végezték el. A Paksi Atomerőmű kéményéből áradó tríciumcsóva csapadékvíz általi kimosódását kísérletileg vizsgálták, modellszámításokat végeztek. Tanulmányozták a legutóbbi glaciális utáni klímaváltozást dél-alföldi vizek nemesgáz-hőmérsékleteire és a radiokarbon-korokra alapozva. Módszerfejlesztést hajtottak végre a cseppkövek folyadék-zárvaiban lévő nemesgázok tömeg-spektrométeres mérése céljából.

Borospincékben végzett folyamatos radonméréseik értékeléséből meghatározták a pincék klímája szempontjából alapvető jelentőségű természetes szellőzési sebességeket. Szintén a radonmérések alapján kimutatták, hogy egyes pincék klímájának alakításában jelentős szerepe van a barometrikus pumpának, vagyis a barometrikus légnyomás változásai által a befoglaló kőzetből kipumpált gázoknak.

Módszerfejlesztést végeztek az Isotoptech Zrt-vel együttműködésben a Radioaktív Hulladékokat Kezelő Közhasznú Nonprofit Kft. Kiegészítő Kazetták Átmeneti Tárolójában (Paks) elhelyezett üzemanyag-kazetták gáztömörségének vizsgálatára és a tárolócsövek nyomgáz-elemzésére.

Különböző tölgyek, valamint hibrideik egyedeinek (20 fa) vízforgalmát vizsgálták a Debreceni Egyetem Síkfőkút Project területén végzett kísérletek során. Egyedülálló idő-sorokat kaptak a vízforgalmat meghatározó paraméterekre vonatkozóan, melyek sokparaméteres analízise a hazai tölgyesek klímaváltozásra adott válaszainak megértését segítik.

Műszerek és gyorsítók

Nemzetközi együttműködésben vizsgálták a gyártó által rendelkezésre bocsátott szilícium fotoelektron-sokszorozók (SiPM) sörétzaját a túlfeszültség függvényében. A mért amplitúdóeloszlás-függvényt analitikus és numerikus módszerekkel szimulálták. Új

megoldású, a SiPM-ek nagy kapacitásának hatását kiküszöbölő, alacsony disszipációjú áramkört fejlesztettek ki SiPM-ekből felépített 2D mátrix helyzetérzékeny kiolvasására. Több módszert dolgoztak ki SiPM fotodetektorok elektro-optikai és nukleáris karakterizálására

Új típusú digitális időzítési módszert dolgoztak ki a mintavételi időnél gyorsabb felfutású jelek esetére. A módszert sikeresen tesztelték LaBr₃ szcintillátorral az Atomki digitális jelfeldolgozó kártyájának alkalmazásával. CsI(Tl) alapú szcintillációs töltöttrészecske-detektorok alacsonyenergiás p- α diszkriminációs küszöbének csökkentése érdekében meghatározták a szilícium lavina fotodiódával (Si-APD) történő kiolvasás optimális feltételeit. Módszert dolgoztak ki nagy hossz/átmérő arányú plasztik szcintillációs neutron-detektorok nagy fénybegyűjtési hatásfokot biztosító optikai csomagolására. E fejlesztések nemzetközi magfizikai kutatásokat segítő detektorrendszerek létrehozását célozzák (GANIL, Caen/FAIR, Darmstadt).

Félvezető detektorokban a sugárzás által keltett és már termalizálódott jeltöltések mozgásának 3D Monte Carlo-szimulációjához meghatározták a domináns szórás folyamatokat leíró törvényszerűségeket, a szórás gyakoriságokat, az irányeloszlásokat és a generálásukhoz tartozó véletlenszám-keltési algoritmusokat.

Digitális jelfeldolgozáson alapuló elektronikát fejlesztettek ki micro channel plate (MCP) elektronsokszorozóval felépített helyzetérzékeny detektorhoz.

Továbbfejlesztették a Cardiotom mobil tomográfias gamma kamerához tartozó képrekonstrukciós szoftvert, kiegészítve az algoritmust „resolution recovery” képességgel, amelynek segítségével a térbeli felbontás a detektortól távolabb lévő források esetén jelentősen javult.

Szoftvert fejlesztettek pozícióérzékeny gammadetektorhoz, amely képes 2D pozíciótréképek, és energiaspektrum gyűjtésére, a kép szűrésére a kijelölt energiatartományban, valamint különböző régiókban az energiaspektrum meghatározására, továbbá az alkalmazott Hamamatsu pozícióérzékeny fotoelektron-sokszorozó inhomogenitásának korrekciójára is.

Elektronspektroszkópiai felhasználásra kifejlesztettek egy 6 csatornás, 0-10kV tartományban lebegtethető digitálisan vezérelhető precíziós 10 ppm stabilitású tápegységet, amelynél az alacsonyfrekvenciás zajkomponens kis értékét akkumulátoros üzem biztosítja. Folytatták a hardver és szoftverfejlesztést a PHENIX (RHIC, BNL) nagyfeszültségű vezérlőrendszerének a felújításához. Sokbemenetű FPGA alapú TDC-t, valamint nagysebességű UDP/IP transzport modult fejlesztettek különböző típusú detektorok jeleinek a feldolgozásához.

A p, d és alfa nyalábokat szolgáltató, számos alapkutatást és alkalmazást kiszolgáló 20 MeV-es ciklotron vezérlő rendszerében 2010-ben jelentős hardver és szoftverfejlesztések történtek.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az Atomki kutatási tevékenysége társadalmi célokat szolgál. Atommagfizikai alapkutatásuk egyik eredményeként pontosítani lehet az atomreaktorok fűtőelemeinek bomláshőjét. Megkezdték a szálló por szennyezettség felmérését iskolákban, óvodákban és munkahelyeken is. E kutatás információval szolgál a városi aeroszol lehetséges környezeti és egészségügyi hatásairól, és hasznos információt nyújt a környezetvédelmi hatóságok, az egészségügy és a társadalom számára is. Kopásvizsgálati és egyéb ipari feladatok megoldásával hozzájárultak az energiafelhasználást és a környezeti terhelést csökkentő módszerek kialakításához. Orvosi és gyógyszeripari fejlesztési projektjeik a lakosság egészségi állapotának javításához járulnak hozzá.

2010-ben 31-dik alkalommal rendezték meg a Fizikusnapokat Az utóbbi évben a középiskolákban a tehetség gondozó programok elterjedése lehetővé tette, hogy nemcsak

Debrecenből, Hajdú-Bihar megyéből, hanem a régió középiskoláiból is jöhessenek diákok. Látogatóik száma 2010-ben több mint 1000 volt, mikor a Fizikusnapok címe „Fizika és az orvostudomány” volt. Az előadások előtt és után lehetőség volt orvosi műszerek megtekintésére, kipróbálására is.

A kutatók éjszakáján nagy sikert aratott Az *Elemi álom* című tudományos szórakoztató film premierje. A film bemutatja az Atomkit, néhány laboratóriumot és azok sikereit, a fizikusok életét és nem utolsósorban a fizika szépségeit. A vetítést a nagy érdeklődésre való tekintettel meg kellett ismételni. A rendezvényen kb. 350-en vettek részt. A filmet levetítette a MTV „m1” csatornája, részleteket mutatott be belőle a Delta tudományos ismeretterjesztő műsor is.

Két, az atomenergiát népszerűsítő rendezvény megszervezésében is részt vettek. Május 6-án került sor az Atomkiban „A Paksi Atomerőmű bővítésének lehetőségei” című rendezvényre, amelyen kb. 180 fő vett részt. Laboratóriumaik poszttereken mutatták be a Paksi Atomerőmű működését segítő tevékenységüket. Társszervezői voltak az „Atomenergiáról – mindenkinek” című országos, ismeretterjesztő, vándorkonferenciának is, amelyre csak a regisztrált látogatók száma 341 volt. Kutatóik 2010-ben két alkalommal szerepeltek a Delta tudományos magazinműsor adásaiban. Az Atomki kutatók, eredmények, vélemények megjelentek egyéb, nem tudományos közleményekben is, a sepsiszentgyörgyi Erdély Hangja folyóirattól kezdve, a Debreceni Szemlén keresztül, a Gerundium Egyetemtörténeti Közleményekben, az ITD Hungary kiadványaiban, a Gazdasági Tükörcső Magazinban, a Népszabadságban, a Figyelőben. Kutatóik aktív tudományos publikációs tevékenységük mellett, ebben az évben is közöltek népszerűsítő cikkeket a Természet Világában, az Élet és Tudományban és a Fizikai Szemlében.

Fiatal kutatóik az intézet képviselőjeként hozzájárulnak a Fiatalok a Nukleáris Energiáért egyesület tevékenységéhez, és képviselik az Atomkit konferenciákon, műszerbemutatókon és fesztiválokon – Debrecenben a Campus fesztiválon, és Budapesten a Sziget fesztiválon. Válaszoltak a fesztiválózó fiatalok kérdéseire, felhívták figyelmüket az energiapolitika, a klímaváltozás, a nukleáris energetika összefüggéseire, és felkeltették az érdeklődésüket a fizika iránt. A Sziget Fesztiválon a sátrukhoz látogatók a 15-féle tesztből 2100 darabot töltöttek ki. A tesztek kétharmada volt magyar, egyharmada 5 különböző nyelven volt elérhető.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Szerteágazó témarendszerben intenzív együttműködés folyik sok hazai és külföldi intézménnyel. Az állandóság mellett a folytonos megújulás is lényeges jellemző; a 2010-es évben került sor együttműködési megállapodás aláírására az Ukrán Tudományos Akadémia ungvári Elektronfizikai Intézetével, a RIKEN Nishina Tudományos Központtal, a Drezda-Rosendorf Kutatóközponttal. A Royal Institute of Technology, az Adolesco AB, a Debreceni Egyetem és két intézete, valamint az Atomki együttműködési keretmegállapodást kötött. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmél oktatási célú együttműködési megállapodást írt alá az intézet. Együttműködési megállapodást kötött az Atomki a Debreceni Egyetem Radiológiai Tanszékével is.

Az intézet kutatómunkájának minden területén széleskörűek a hazai együttműködések. Elmondható, hogy ezeknek a kapcsolatoknak jelentős része már évekre, évtizedekre visszamutat és a biztos alapját, beágyazottságát szolgáltatja a fizikai alap- és alkalmazott kutatásoknak az Atomkiban. Az együttműködések zöme az MTA RMKI, a Debreceni Egyetem (DE), az MTA AEKI, a BME, a Szegedi TE, a Miskolci Egyetem, a Veszprémi

Egyetem, az MTA MFA, az MTA SZFKI, valamint az MTA Régészeti Intézete, a Budapesti Történeti Múzeum és a Magyar Nemzeti Múzeum munkatársaival közösen volt.

A 2010 évben indított, vagy megújított kutatási projektumok között a legjelentősebb hazai partnereik:

- *atomfizika és alkalmazásai*: a BME Kísérleti Fizikai Tanszéke, az Alkaloida Kutató és Fejlesztő Kft., az MTA MFA és RMKI, az ISOTOPTECH ZRt.,
- *kondenzált rendszerek fizikája*: az MTA SZTE Lézerfizikai Kutatócsoportja, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, az ELTE Magkémiai Intézete, a TKI Ferrit Kft, a Kémiai Kutatóközpont, a Kraft Projekt Zrt., a Szegedi TE, a Paksi Atomerőmű Zrt.;
- *ionnyaláb-analitika*: az MTA Pannon Egyetemi Levegőkémiai Kutatócsoportja, a Szegedi TE Régészeti Tanszéke, az Országos Környezet-egészségügyi Intézet, az Országos Meteorológiai Szolgálat, a DEOEC Bőrgyógyászati Klinika;
- *környezetanalitika és kormeghatározás*: az ELTE, püspökszilágyi RHKT Kht., a MECSEKÉRC Környezetvédelmi ZRt., a MecsekÖKO Környezetvédelmi ZRt., a Fácies Bt., az Envicom 2000 Kft., a Hydrosys Kft., a Smaragd GSH Kft., az Enviroinvest Kft., a VIZITERV Environ Kft, Nyíregyháza, a BME Nukleáris Technikai Intézete, az ISOTOPTECH ZRt., a Scopia Bt., az AktAnal Bt., a RadAnal Bt.;
- a Pharmapolis Klaszter projektársaságaként megalapították a *Pharmatom Hungaria Kft.*-t, mely cég a korszerű PET-diagnosztikumok fejlesztését ambicionálja gyógyszerkipróbálások korai fázisban történő alkalmazására.
- további projektársaság, amelynek munkájában részt vesznek az *ICONO-Pharma Innovációs és Technológiai Szolgáltató Kft.*, azzal a céllal, hogy az innovatív gyógyszerfejlesztés és gyártás területén elkötelezett szolgáltatók számára magas minőséget garantáló K+F+I környezetet biztosítson.
- az Atomki aktív munkát végez az Űripari, valamint a Termál és Egészségipari klaszterek munkájában, valamint az intézet érdekszférájába tartozó – egészségipar, mechatronika és környezetanalitika – K+F+I területen. 6 kültaggal saját klasztert hozott létre Prizmatech névvel.

Részvétel a felsőoktatásban

Az intézet 2010-ben megtartotta korábban is betöltött szerepét a felsőoktatásban, a Debreceni Egyetemmel fenntartott hagyományos kapcsolatait. Az Atomki kutatói a beszámolási időszakban meghirdetett 64 kurzus keretében 1033 tantervi óra megtartásával járultak hozzá a Debreceni Egyetemen (DE) folyó oktatáshoz. A gyakorlati órák száma a DE-n 2010-ben 528 volt 41 kurzus keretében. Az oktatásban összesen 35 kutató vett részt. A pregraduális képzésben elsősorban fizikus, fizika tanári, informatikus, programtervező matematikus, környezettan, környezettudományi, valamint környezetgazdálkodási agrármérnök szakos hallgatókat oktattak (előadások, speciális laboratóriumi gyakorlatok, diplomamunkák). A beszámolási időszak folyamán 14 PhD, 11 diplomamunkás és 7 TDK-hallgató dolgozott az intézetben, a témavezetésre fordított órák száma összesen 1948 volt.

A korábbi évek hagyományát követve az intézet a DE Fizikai Intézetével és Informatikai Karával közösen 2010-ben is meghirdette a Nukleáris képalkotás című tárgyat. A tárgykörben további fejlemény a BME és a Kolozsvári Bábes-Bólyai egyetemekkel kötött oktatási együttműködés. 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.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az Atomki a legnagyobb volumenű támogatásokat nemzetközi téren az AC²T Research GmbH Austria, az Alapítvány a Távközlési és Telematikai Felsőoktatásért, az EGT Norvég Finanszírozási Mechanizmus - OTKA, az ENIAC Call 2009, az Európai Unió, az IAVF, az ÚT Battelle LLC (USA) szervezeteknél, hazai vonatkozásban pedig az Alapítvány a Távközlési és Telematikai Felsőoktatásért, az NFÜ, az NKTH, az NKTH – OTKA, az OTKA, a Paksi Atomerőmű Zrt. és a Radioaktív Hulladékokat Kezelő Kft. nevű szervezeteknél nyerte.

Az intézetnek 95 pályázata volt 2010-ben. Az alábbiakban felsoroljuk azt a 38-at, amelyeknél 10 millió Ft-nál nagyobb a teljes összeg, és megadjuk, hogy a pályázatból mekkora összeg az Atomkié, valamint hogy 2010-re ebből mennyi jut. A pályázatok időtartama 1-től 5 évig terjed, a leggyakoribb a 3-5 éves időtartam.

AC²T Research GmbH Austria: Kopásvizsgálat, 25440 EUR - 15540 EUR ||

Alapítvány a Távközlési és Telematikai Felsőoktatásért: Mikrohullámokra alapozott fejlesztési és kutatási tevékenységek, 30000 eFt – 30000Ft ||

EGT Norvég Finanszírozási Mechanizmus - OTKA: Városi aeroszol analízise Kelet-magyarország régióban, 14551 eFt – 3929 eFt ||

ENIAC Call 2009: A központi idegrendszer leképezése, 50100 EUR – 13917 EUR ||

NKTH: A központi idegrendszer leképezése, 67976 eFt ||

Európai Unió: Mesterséges gyémánt alapú sugárzásdetektorok fejlesztése sugárterápiás célokra, 34242 EUR – 10040 EUR || E+ E- Detektorfejlesztés 79500 EUR ||

EURATOM Fúziós Tréning, 149227 EUR || A jövő laboratóriuma az anyagtudományban és anyagmérnökségben, 95444 EUR – 23861 EUR || Trícium -

oktatási program, 65000 EUR - 24000 EUR || Cseppkövek folyadékzárvaiban oldott nemesgázok, 45000 EUR – 11250 EUR || Felületi kopásvizsgálat, 82267 EUR – 5000

EUR || Kollektív gerjesztések atomi ionizációban félvezetőkben és biológiai szövetekben, 100000 EUR – 25000 EUR || Asztrofizikai p-folyamat szempontjából

lényeges magreakciók vizsgálata, 750000 EUR – 159024 EUR || CHARISMA-program, 197000 EUR – 35040 EUR || Gammaspektroszkópiához kapcsolódó detektor- és

elektronikai fejlesztés, 12000 EUR – 2427 EUR ||

IAVF: Kopásvizsgálat, 45793 EUR – 8100 EUR ||

ÚT Battelle LLC (USA): Mintakészítés, 37880 USD – 37880 USD ||

NFÜ: Épületek hőveszteségének csökkentése, 71816 eFt - 71816 eFt || Komplex épületenergetikai fejlesztés, 342208 eFt – 119208 eFt || Az Észak-alföldi PRIZMATECH Debreceni Műszergyártó és Fejlesztő Klaszter Menedzsment, 30764 eFt ||

NKTH-OTKA: Magfizikai módszerekkel az elemek keletkezésének nyomában, 18000 eFt – 9000 eFt || Magasabbrendű effektusok vizsgálata atomoknál, 10000 eFt – 5022 eFt || Új fizika keresése a CMS detektorral a CERN-ben, 29359 eFt – 14539 eFt || Gázionforrás és előkészítési módszerek fejlesztése környezeti mintáknál || 18747 eFt || A Napban lejátszódó 3He + 4He reakció asztrofizikája, 24000 eFt – 12000 eFt || Debreceni LHC Grid központ, 65300 eFt – 65300 eFt ||

NKTH: Az összetevők kémiai állapotának meghatározása felületi rétegeknél, 71250 eFt – 71250 eFt || Újgenerációs, környezetbarát vékonyréteg napelemek, 40000 eFt – 10000 eFt || Multi-modalitású képalkotó-rendszer, 82112 eFt ||

OTKA: Szimmetriák a kvantummechanikai soktestproblémában, 11000 eFt – 2800 eFt ||

Alapvető kölcsönhatások és egzotikus magállapotok vizsgálata lézerekkel és részecskenyalábokkal, 23157 eFt – 6407 eFt || A Kárpátok vonulatát követő intruzív testek szerepe, 10660 eFt – 2787 eFt || Az atomi környezet hatása a rezonáns és nem

rezonáns folyamatoknál, 16000 eFt – 4000 eFt || Sugárkárosodás szempontjából fontos atomi folyamatok, 12460 eFt – 2770 eFt || A nehéz elemek nukleoszintézise, 21998 eFt – 6940 eFt ||

Paksi Atomerőmű Zrt: Nehezen mérhető izotópok meghatározása folyékony radioaktív hulladékokban, 44932 eFt – 22798 eFt ||

Radioaktív Hulladékokat Kezelő Kft.: Püspökszilágyi RHT területén vett környezeti minták vizsgálata, 108788 eFt – 25990 eFt ||

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Algora A, Jordán D, Taín JL, Rubio B, Agramunt J, Perez-Cerdan AB, et al. (42), Krasznahorkay A, Hunyadi M, Gulyás J, Vitéz AC, Csatlós M, Csige L: Reactor decay heat in ^{239}Pu : Solving the gamma discrepancy in the 4-3000-s cooling period. *Physical Review Letters* (ISSN: 0031-9007) 105: Paper 202501(4) (2010)
2. Elekes Z, Vajta Zs, Dombrádi Zs, Aiba T, Aoi N, Baba H, et al. (23), Fülöp Zs, Kiss Á, Sohler D: Nuclear structure study of $^{19,21}\text{N}$ nuclei by gamma spectroscopy. *Physical Review C*, 82:(2), 7305-4 (2010)
3. Force C, Grévy S, Gaufrey L, Sorlin O, Caceres L, Rotaru F, et al. (24), Dombrádi Z, Sohler D: Prolate-spherical shape coexistence at $N=28$ in ^{44}S . *Physical Review Letters* (ISSN: 0031-9007) 105: Paper 102501(4) (2010)
4. Gyürky Gy, Elekes Z, Farkas J, Fülöp Z, Halász Z, Kiss GG, et al. (12), Somorjai E, Szücs T: Alpha-induced reaction cross section measurements on ^{151}Eu for the astrophysical gamma-process. *Journal of Physics G* (ISSN: 0954-3899) 37: Paper 115201:(15) (2010)
5. Huszánk R, Szilasi SZ, Rajta I, Csik A: Fabrication of optical devices in poly(dimethylsiloxane) by proton microbeam. *Optics Communications* 283: 176-180 (2010)
6. Itagaki N, Cseh J, Ploszajczak M: Simplified modelling of cluster-shell competition in ^{20}Ne . *Physical Review C* 83 (ISSN: 0556-2813): Paper 014302(12) (2010)
7. Juhász Z, Sulik B, Rácz R, Biri S, Bereczky RJ, Tőkési K, et al. (9), Kövér Á, Pálinkás J, Stolterfoht N: Ion guiding accompanied by formation of neutrals in polyethylene terephthalate polymer nanocapillaries: Further insight into a self-organizing process. *Physical Review A* (ISSN: 1050-2947) 82: Paper 062903(7) (2010)
8. Knudsen H, Torii HA, Charlton M, Enomoto Y, Georgescu I, Hunniford CA, et al. (15), Tőkési K: Target structure induced suppression of the ionization cross section for very low energy antiproton-hydrogen collisions. *Physical Review Letters* (ISSN: 0031-9007) 105: Paper 213201(4) (2010)
9. Lévai G, Arias JM: Search for critical-point nuclei in terms of the sextic oscillator. *Physical Review C* (ISSN: 0556-2813) 81: Paper 044304(11) (2010)
10. Mohr P, Galavíz D, Fülöp Z, Gyürky G, Kiss GG, Somorjai E: Total reaction cross sections from elastic alpha-nucleus scattering angular distributions around the Coulomb barrier. *Physical Review C* 82 (ISSN: 0556-2813): Paper 047601(3) (2010)
11. Molnár M, Haszpra L, Svingor É, Major I, Svetlik I: Atmospheric fossil fuel CO_2 measurement using a field unit in a CentralEuropean city during the winter of 2008/09. *Radiocarbon* (ISSN: 0033-8222) 52: (2-3) 835-845 (2010)

12. Nándori I, Nagy S, Sailer K, Trombettoni A: Phase structure and compactness. Journal of High Energy Physics (ISSN: 1126-6708) : Paper 090069(25) (2010)
13. Pál KF, Vértesi T: Maximal violation of a bipartite three-setting, two-outcome Bell inequality using infinite-dimensional quantum systems. Physical Review A 82: 022116 (2010)
14. Palcsu L, Major Z, Köllő Z, Papp L: Using an ultrapure ^4He spike in tritium measurements of environmental water samples by the ^3He -ingrowth method. Rapid Communications in Mass Spectrometry (ISSN: 0951-4198) 24: 698-704 (2010)
15. Peter L, Csik A, Vad K, Toth-Kadar E, Pekker A, Molnar G: On the composition depth profile of electrodeposited Fe-Co-Ni alloys. Electrochimica Acta 55:(16) 4734-4741 (2010)
16. Rácz R, Biri S, Pálinkás J: Electron cyclotron resonance plasma photos. Review of Scientific Instruments (ISSN: 0034-6748) 81: Paper 020708(3) (2010)
17. Rajta I, Gál G A B, Szilasi S Z, Juhász Z, Biri S, Mátéfi-Tempfli M, Mátéfi-Tempfli S: Nanochannel alignment analysis by scanning transmission ion microscopy. Nanotechnology 21:(29) 295704. Paper 295704. (2010)
18. Ricz S, Ricsóka T, Holve K, Borovik AJ, Bernhardt D, Schippers S, et al. (9), Kövér Á, Varga D: Interference effect in the dipole and nondipole anisotropy parameters of the Kr 4p photoelectrons in the vicinity of the Kr(3d)-1 \rightarrow np resonant excitations. Physical Review A (ISSN: 1050-2947) 81: Paper 043416(7) (2010)
19. Sarkadi L: Classical trajectory Monte Carlo model calculations for ionization of atomic hydrogen by 75-keV proton impact. Physical Review A (ISSN: 1050-2947) 82: Paper 052710(11) (2010)
20. Stobinski L, Lesiak B, Kövér L, Tóth J, Biniak S, Trykowski G, Judek J: Multiwall carbon nanotubes purification and oxidation by nitric acid studied by the FTIR and electron spectroscopy methods. Journal of Alloys And Compounds (ISSN: 0925-8388) 501: 77-85 (2010)
21. Stolterfoht N, Hellhammer R, Juhász Z, Sulik B, Bodewits E, Dang HM, Hoekstra R: Guided transmission of 3-keV Ne^{7+} ions through nanocapillaries in insulating polymers: Dependence on the capillary diameter. Physical Review A (ISSN: 1050-2947) 82: Paper 052902(8) (2010)
22. Tárkányi F, Ditrói F, Király B, Takács S, Hermanne A, Yamazaki H, et al. (9): Study of activation cross sections of proton induced reactions on barium: Production of $^{131}\text{Ba} \rightarrow ^{131}\text{Cs}$. Applied Radiation and Isotopes (ISSN: 0969-8043) 68: 1869-1877 (2010)
23. Vértesi T, Pironio S, Brunner N: Closing the detection loophole in Bell experiments. Physical Review Letters 104: 060401 (2010)
24. Wang ZM, Chapman R, Liang X, Haas F, Bouhelal M, Azaiez F, et al. (39), Dombrádi Z: Intruder negative-parity states of neutron-rich ^{33}Si . Physical Review C 81 (ISSN: 0556-2813): Paper 064301(7) (2010)
25. Wilson AN, Korichi A, Siem S, Astier A, Bazzacco D, Bednarczyk P, et al. (26), Nyakó BM, Timár J: Two-particle separation energy trends in the superdeformed well. Physical Review Letters (ISSN: 0031-9007) 104: Paper 162501(4) (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Atommagkutató Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	198	Ebből kutató ² :	103
PhD, kandidátus:	62	MTA doktora:	14
		Rendes tag és levelező tag:	3
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			22

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			296
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			277
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	5	idegen nyelven: 9
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 169
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 168
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	1	idegen nyelven: 1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	451,70	Összes független hivatkozás száma:	1883
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1883		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	1
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			99
		posztterek száma:	70
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	12		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			35
Témavezetések száma: TDK munka:	7	Diplomamunka (BSc):	11
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	14

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		764,13	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	15	Teljes saját bevétel:	483,81 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			12
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	32,86 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			19
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	19	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	46,33 MFt
ÚMFT témák száma:	5	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	147,36 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	1,16 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			31
EU forrásból:	15	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	38,43 MFt
Egyéb:	16	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,68 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			169,28 MFt

FÖLDRAJZTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

1112 Budapest, Budaörsi út 45.; 1554 Budapest, Pf. 130.

telefon.: 1-309 2628; fax: 1-309 2628

e-mail: kocsisk@mtafki.hu; honlap: www.mtafki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatóintézet 2010-ben is a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának tagjaként végezte tudományos tevékenységét. A kutatóhely hosszú távú, kiemelt alapkutató feladata az ország természeti környezetében rövid és hosszútávon várható változások kutatása, továbbá a társadalmi-gazdasági térszerkezet átalakulási folyamatainak vizsgálata. Ezek egyaránt kapcsolódtak nemzetközi pályázatok során elnyert kutató projektekhez (SeFoNe, EU-LIFE SOWAP, EU-FP6 BORASSUS, ACRE, DfG, stb.), a hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez (OTKA, NKA stb.). A hon- és nemzetismeret terén kiemelt feladat volt a „Magyarország kistájainak katasztere” átdolgozott és bővített kiadásának megjelentetése, illetve a széleskörű együttműködésben készülő, Magyarország Nemzeti Atlasza előfutárának számító „Magyarország térképekben” című tematikus atlaszmű összeállítása, szerkesztése és a 2011. évi kiadáshoz való előkészítése.

A kutatóintézet természetföldrajzi kutatásainak fő feladatait 2010-ben a korábban megkezdett projektek folytatása, az eredmények hazai és nemzetközi fórumokon való bemutatása jelentette. Az alábbi kutató programok önálló illetve együttműködésben való művelése zajlott: „Az árkos erózió szerepe Magyarország jelenkori felszínfejlődésében” c. OTKA szerződéssel kapcsolatos munkák elindítása, a terepbejárás, terepi felmérések megkezdése. A SOWAP 2010 keretében folyó, a Syngenta által támogatott „Talaj- és felszíni vízvédelem minimum talajművelés alkalmazásával Észak- és Közép-Európában” című projekt és a „Margins” projektszerződésben rögzített, kutató feladatainak megszervezése és lebonyolítása. Folytatódott a talajeróziós modellezés kiterjesztését további talajtípusokra illetve a laboratóriumi módszerfejlesztést idej mérési eredmények alapján. A Természetföldrajzi Osztály munkatársai a 2010. május 13–15-én Kerekegyházaán lezajlott IV. Magyar Tájökológiai Konferencia szervezésében és lebonyolításában is jelentős részt vállaltak.

2010-ben is komplex tudományos feladatot jelentettek a nukleáris energiatermelés során keletkező kis és közepes radioaktivitású hulladékok lerakására és biztonságos elhelyezésére alkalmas területeken végzendő kutatások. Ehhez kapcsolódóan széleskörű környezet-megfigyelési, vízföldrajzi és talajeróziós vizsgálatokra került sor a Bábaapáti NRHT, továbbá Püspökszilágyi RHFT hatásterületén.

2010-ben a Geomorfológiai Osztály három fő témakörben folytatta kutatásait. A Paksi Atomerőmű tervezett bővítéséhez előkészítő geomorfológiai és neotektonikai kutatásokat végeztek, ennek keretében az atomerőmű tágabb környezetében és az erőműtől É-ÉK-re fekvő Duna menti-sík területeinek térképezése, a domborzati formák, felszín neotektonikai vizsgálata, valamint a földrengések és a környezetgeomorfológiai összefüggések kutatása történt meg. A geomorfológiai jellegű stratégiai kutatások közül az Ajkai vörösiszap-zagyártározók katasztrófája kapcsán az MTA elnöke felkérte az intézetet, hogy a környezetben bekövetkezett károk rehabilitációjára dolgozzon ki egy tudományos programot. Ennek keretében elkészült a „Torna-patak szabályozása az Ajkai vörösiszap-tárolók környezeti állapot javítása céljából” című tanulmány. Ehhez kapcsolódóan értékelték a magyarországi vörösiszap-tározók környezetföldrajzi helyzetét is. 2010. évi hazai ár- és belvizek ismét ráirányították a figyelmet arra, hogy egy komplex vízgazdálkodási terv keretében az alföldi

területeken rendezni kell a hullámtereket és az alacsony ártéri felszíneket. Ennek érdekében a Geomorfológiai Osztály több más kutatóintézettel működött együtt egy ár- és belvíz-mentesítési stratégia kidolgozásában.

Az alapkutatások keretében 2010-ben is a kiemelt feladatok között szerepelt a tárgyévben futó öt (Az árkos erózió szerepe Magyarország jelenkori felszínfejlődésében, Negyedidőszaki üledékek korrelációja; A Kárpát-Pannon térség országainak etnikai földrajza és térképezése; Egészségturizmus és életminőség Magyarországon; és az Ipari parkok közlekedési hálózati helyzete című) OTKA kutatás folytatása.

2010-ben több EU-s keretprogramhoz kapcsolódó kutatás zárult, így az ACRE („Accommodating Creative Knowledge: competitiveness of European metropolitan regions within the enlarged Union”) és a SeFoNe (Searching for Neighbours: dynamics of physical and mental borders in the New Europe”). Az MTA és a DfG közös finanszírozásban egy projekt futott 2010-ben: a „Revitalisierung von gründerzeitlichen Altbauwohnquartieren in Budapest – Prozesse, Strategien, Perspektiven”, míg a DfG támogatásával a „Zwischen Gentrification und Abwärtsspirale” projektcímen folytak kutatások. Az év során továbbá az MTA Elnökség megbízása keretében 2009-ben kiadott „Hungary in Maps” című tematikus angol nyelvű atlaszmű magyar nyelvű kiadását („Magyarország térképekben”) készítették elő, illetve megjelent „Magyarország kistájainak katasztere” c. 876 oldalas szakkiadvány, mely mind szakmai mind szélesebb társadalmi körökben nagy sikert aratott.

Az év során több külső megbízásos munkát is elvégeztek az intézet munkatársai (pl. „Szob város integrált településfejlesztése” (Szob Város Önkormányzata); „A Paksi Atomerőmű környezetében elhelyezkedő veszélyes ipari üzemek tevékenységének felmérése” (ETV-ERŐTERV). Ugyanakkor folytatódott egy Bolyai János Ösztöndíj projekt is („A gazdasági válság hatásai a városfejlődésre és a nagyvárosok versenyképességére Magyarországon”).

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Természetföldrajzi kutatási eredmények

A Paksi atomerőmű tervezett bővítéséhez előkészítő geomorfológiai és neotektonikai kutatások keretében terepi kutatások folytak, melyek célja a tervezett bővítés helyszínének feltárása, értékelése. Mivel a Duna menti-sík és a Duna–Tisza köze északi részének geomorfológiai helyzetét a kistájak határait, domborzati formáit a Kárpát-medence újharmadidőszaki fejlődéstörténete jelentősen meghatározza, ezeket a felszíneket térképezték és földtani üledéksorozatait vizsgálták az atomerőmű környezetében az alapfeltárásokban és a fúrásokban. Ezek tükrében témajavaslatokat dolgoztak ki a további geomorfológiai, geoökológiai, társadalomföldrajzi kutatásokra.

A geomorfológiai jellegű stratégiai kutatások legfontosabbika az ajkai vörösiszap-tározó katasztrófája kapcsán végzett feltáró és elemző munka volt. A katasztrófa híre bejárta a világot és szomorúan aktuálissá tette, a havária események és a természeti katasztrófák kutatásának témakörét, ráirányította a figyelmet a földrajzi környezet különböző tényezőinek szerepére az ipari és természeti katasztrófák kialakulásában, és felelős gondolkodásra készítetett a megelőző, biztonságot növelő intézkedések terén. Az intézet koordináló szerepet vállalt egy környezetvédelmi stratégia kidolgozásában a további hasonló katasztrófák

megelőzésének érdekében. A kutatók elvégezték a hazai hasonló tározók geomorfológiai felmérést is.

„Az árvízvédelem és az árvízi biztonság hosszú távú stratégiája” c. projekten belül megállapítást nyert, hogy az elmúlt 10–15 évben a szélsőséges időjárás és az antropogén beavatkozások együttes hatására egyre gyakrabban bekövetkező, rekord vízmagasságokat is megdöntő árhullámok keletkeztek. Az intézet geomorfológusai által javasolt megoldás szerint, ahol a felszín adottságai lehetővé teszik, ott a folyónak vissza kell adni a szabad mozgásteret annak alacsony ártéri szintjén, ezzel megteremteni a hagyományos vízgazdálkodás és az alacsony ártéri víztározás feltételeit. A hullámtéri feliszapolódás miatt a gátak emelésének lehetőségei korlátozottak. 50–100 évre előre mutató vízügyi stratégiára van szükség.

Laboratóriumi módszerfejlesztés során az ország vezető talajtani kutatóhelyein párhuzamos méréseket végeztek talajok és üledékek mechanikai összetételének meghatározására. Így az intézet lézer diffraktométerének mérési eredményeit hasonlították össze hagyományos, ill. alternatív méréstechnikával elért eredményekkel. Az eredmények visszaigazolták a módszerek eltérő végeredményét mind az egyes mintákra, mind a mérés egészére vonatkozóan, vagyis nem közömbös, hogy a mintát pipettás, vagy lézer diffraktométeres módszerrel vizsgálták, mert a mérési eredmények eltérőek, elsősorban az agyag frakció különbözik. Az eddigi mérések értékelése után egy-két módszert kívánnak még tesztelni több talajtípuson is a következő évben.

A talajerózió modellezés témájában mesterséges esőztetési kísérletek mérési eredményeit hasonlítják össze talajerózió és lefolyásbecslő matematikai modellek által generált eredményekkel. A korábban, két talajtípuson elvégzett összehasonlításokon túl, 2010-ben újabb két talajtípuson összesen 12 csapadékeseményre végezték el a talajpusztulás becslését. Az eredmények feldolgozása és a statisztikai elemzés folyamatban van, az eredmények közzététele 2011 folyamán várható.

„Az árkos erózió szerepe Magyarország jelenkori felszínfejlődésében” című OTKA projekt keretében kis és nagy méretarányú vizsgálatokat végeztek. Ezek eredményei közül területmi okokból csak némelyek kiemelésére van mód.

Kis méretarányú vizsgálatok esetén Magyarország egész területén rögzítik a vízmosásokat digitális formában. Az ország középhegységi és dombvidéki területeiről az év végéig összesen több mint 105 000 vonalas eróziós formát jelent. Ezek összes hosszúsága meghaladja a 21 millió km-t. Megadták az egyes vízmosások környezetének földhasználatát és talajviszonyait is. Tendenciaként megállapítható, hogy az átlagos hosszúságú vízmosáshosszak szántóföldesetében nagyobbak, mint rét területhasználatnál, sőt a legtöbb esetben az erdőt is megelőzik. A vízmosások jelentős része (85–90%) erdőben volt található a vizsgált területeken. Az erdön kívüli vízmosások részaránya csak a csekélyebb felszabdaltságú területen nőtt.

A nagyméretarányú vizsgálatok esetén a mintaterületeken a vízmosások kialakulásának feltételezett idejét vizsgálták. A Tetves-patak vízgyűjtőjén kijelölt mintavízmosásokban a csapadékok által erodált anyagból hordalékmintákat vettek. Négy csapadék mintái alapján elmondható, hogy a szerves széntartalom mindkét vízmosásban lejtőirányban csökkent. Ebből arra lehet következtetni, hogy a vízmosások nem csak a tetőszinten erodálódott humuszos feltalaj szállító pályái, hanem önmaguk is erodálódnak és alapkőzet jellegű (szerves szén mentes) anyaggal „hígítják” a vízmosásokból kilépő hordalékot. Ennek szerves szén tartalma

nincs direkt összefüggésben a lefolyást kiváltó csapadékok mennyiségével és intenzitásával. Az egyes csapdákból felfogott hordalékok szemcseméretének mediánja mindkét vízmosásban lejtőirányban haladva szintén csökkenő tendenciát mutat. A 2009-ben elvégzett vízmosás-felmérés adatait feldolgozva a vizsgált vízmosásokról digitális terepmodelleket készítettek. E terepmodelleket egy korábbi felmérés (2003) eredményeihez viszonyítva megállapították, hogy az északi vízmosás aktívan pusztuló függőleges falakkal és éles peremekkel bír, míg a déli stabilabb falain a növényzet is képes megtelepedni, annak ellenére, hogy a déli vízmosásnak kétszer akkora a vízgyűjtőterülete, mint az északinak.

A SOWAP szentgyörgyvári kísérleti telepén ahol hetedik éve folynak mérések és kísérletek 2009–2011-ben a folytonos eróziós vizsgálatok mellett elsősorban a növényvédőszeres lemosódását, azok felszíni vizekben való megjelenését vizsgálják. Két éve azt is mérik, hogy a parcella alsó szakaszán elhelyezett szegély (füves sáv) milyen hatással van a lefolyásra és az erózióra.

A Borassus projekttel (Geotextilek alkalmazása a talajvédelemben) kapcsolatos jelentős tudományos eredmény, hogy sikerült kimutatni a geotextilek talajnedvességre gyakorolt hatásának, a nedvesség dinamikájának különbségeit a mintaterületek földrajzi elhelyezkedésének és a geotextilek anyagminőségének függvényében. A mintaterületek különböző éghajlati övekben helyezkednek el. Az eredmények brazil, kínai, magyar, litván, thaiföldi és vietnami mérések kiértékelése alapján fogalmazódtak meg. A mérési időszak hossza, illetve a vizsgált minták száma országonként különböző volt. A méréseket a talajerózió mérő parcellák mellett végeztük, gravimetrikus módszer alkalmazásával. Az eredmények azt mutatják, hogy nincs nagy különbség az alkalmazott geotextilek talajnedvességre gyakorolt hatását illetően az anyagminőség szerint. A legnagyobb hatékonyság kevesebb, mint 1500 mm évi csapadék mennyiség és 20 °C-nál kisebb évi hőingadozás esetén volt mérhető. A monolit kísérletek szerint a geotextilek talajnedvesség visszatartó hatásának hatékonysága a talaj száraz–nedves periódusainak arányától függ. A geotextilek nemcsak a talajerózió megfékezésére alkalmasak, hanem kedvezőbb nedvességi viszonyok megteremtése által gátakon és egyéb mesterséges rézsűkön is kedveznek a védő gyeptakaró kifejlődésének.

A „Szántásos és talajkímélő művelések talaj-vízgazdálkodási vizsgálata” című projektet a magyarországi Syngenta megbízásából végezték a szentgyörgyvári kísérleti állomáson. Elsődleges feladatuk a hagyományos szántásos (forgatásos) ill. talajkímélő (nem forgatásos, sekély) művelések hatásának vizsgálata a talaj vízgazdálkodására. Az elvégzendő feladatok a következők voltak: fizikai alapvizsgálatok, talajfizikai vizsgálatok VÉR csöves eljárással, kémiai vizsgálatok, mikrobiológiai aktivitás vizsgálata Unger-féle cellulóz teszttel, a talaj-makrofauna vizsgálata, fenológiai vizsgálat. A mért talajtani, vízgazdálkodási, lefolyási, valamint agronómiai és meteorológiai adatok alapján elkészítették a terület egyszerűsített vízmérlegét, valamint értékelték a hagyományos és talajkímélő művelés hatására bekövetkezett változásokat a korábbi (2004–2006) adatok tükrében. Vizsgálataik eredményeiről egy 85 oldalas jelentésben számoltak be.

Társadalomföldrajzi kutatási eredmények

Az ipar közlekedés-földrajzi összefüggéseit vizsgáló OTKA kutatás keretében 210 ipari parkra kiterjedő kérdőíves feldolgozás eredményeként az ipari parkokat közlekedési kapcsolataik alapján fő csoportokba sorolták és tipizálták. Megállapították, hogy az ipari parkok telephelyválasztásában milyen közlekedési hálózati elemek játszottak szerepet. A kutatás hozzájárulhat az ipar és a közlekedés közötti mélyebb kapcsolatrendszer megismeréséhez. Az

új összefüggések, a kutatás eredményei a Gazdasági Minisztérium gazdaságfejlesztési céljainak és a Nemzeti Fejlesztési Tervben kiemelt prioritást kapott közlekedésfejlesztési céloknak a megvalósítását is megalapozzák. Ezentúl a kutatás eredményei az oktatásban hasznosulnak és más kutatásokhoz szolgálhatnak adalékkul. A kutatás relevanciája nem vitatható a jelenlegi társadalmi viszonyok között, amikor egyre fontosabb az erőforrások hatékony hasznosítása és a versenyképesség fokozása, valamint a közlekedés, a szállítás költségeinek minimalizálása.

Az „Egészségturizmus és életminőség Magyarországon: az egészségorientált mobilitás társadalmi, gazdasági és környezeti problematikájának földrajztudományi szintézise” című OTKA kutatás eredményeit a „Boldogító utazás: a turizmus és az életminőség kapcsolatának magyarországi vonatkozásai” című szakkönyvben jelentette meg az intézet. A kutatásban 500 fős mintán kérdőívesítés segítségével feltárták az orosházi lakosság általános közérzetét és a turizmusban való érintettségét.

Tekintettel arra, hogy Magyarország gazdaságfejlesztésében a turizmus prioritásnak tekinthető, amelyen belül az egészségturizmus fejlesztése külön is hangsúlyozott tényező, ezért az egészségturisztikai motivációval történő utazások életminőségre gyakorolt kedvező hatásának kimutatása minden szolgáltató és kapcsolódó vállalkozó gazdasági érdeke. Azok az önkormányzatok (fürdővárosok), pályázatkészítő tanácsadók, vállalkozások, akik az egészségturizmusban érdekeltek, a kutatás során feltárt eredményeket, a fejlesztésekhez szükséges források elnyerése érdekében végzett érvelés során tudják felhasználni. A kutatás relevanciáját bizonyítja, hogy a Széchenyi-terv, az Új Magyarország Fejlesztési-terv és az Új Széchenyi-terv is prioritásként kezelte/kezeli az egészségturizmust, ebből a szempontból a kutatási eredmények kormányzati szinten is jól hasznosíthatók. Az életminőség kérdése össztársadalmi szinten jelentkező probléma, különösen a lakosság kedvezőtlen egészségi állapotát tekintve, így az egészségi mutatók utazások révén történő javítása nemzetpolitikai kérdés. E mellett nem lehet elhanyagolni azt sem, hogy azoknak a településeknek a lakossága, ahol az egészségturizmus fejlett, kedvezőbb életminőséget nyújtó környezetben élhet.

A nemzeti kulturális örökség megőrzése tekintetében megjegyzendő, hogy a fürdő létesítmények jelentős része műemléki védelemmel rendelkezik, így a fejlesztésük össztársadalmi fontosságának kiemelése, az épületek megóvásához, rekonstrukciójához is hozzájárul.

A Kárpát-Pannon térség országainak etnikai földrajza és térképezése című OTKA projekt során az év folyamán elkészült a térképmű címlapjához a vízrajzi hálózat, a többnyelvű toponímiai adatbázis, illetve a hátoldalán szereplő történeti etnikai térképek egyes időpontjaira az etnikai információs rendszer a vizsgált kb. 34 ezer településre vonatkozólag. Az év folyamán sikerült az OTKA kutatási eredményeit is tartalmazó egy monográfiát megjelentetni.

„Accommodating Creative Knowledge: competitiveness of European metropolitan regions within the enlarged Union” (ACRE). Az ACRE (EU FP6) projekt negyedik, záró évében számos úttörő jellegű tudományos eredmény született. Az előző három év empirikus kutatásai alapján sikerült az európai városok, ezen belül Budapest számára olyan hosszú távú stratégiai célkitűzéseket megfogalmazni, amelyek a kreatív gazdaság jövőbeni gyorsabb fejlődését segíthetik elő. Ezen jelentést eljuttatták a Főváros döntéshozóinak, valamint ismertették a szeptemberi záró konferencia (Creativity Konferencia) résztvevőivel. A fentiek mellett készült egy „közpolitikai kézikönyv” is, amely a kreatív gazdaság fejlesztéséhez nyújt segítséget a döntéshozóknak. A projekt, és annak eredményei kiemelkedő relevanciával bírnak a jelenlegi

társadalmi viszonyok között, hiszen Magyarország számára az elkövetkező évek egyik nagy kihívása éppen az, hogy miként tudja gazdaságát dinamizálni, hogyan lesz képes a tudásigényes (kreatív) ágazatokat – más országoknál jobban – magához vonzani. A projektben kimutatták a városhierarchia és a kreatív gazdaság közötti szoros, de nem automatikus hazai összefüggést. Feltárták és számos rendezvényen ismertették a hazai városhálózat differenciálódását a kreatív gazdaság szempontjából. Kimutatták az élenjáró (felzárkózó) és a leszakadó városok körét, s magyarázták a területi folyamatokat.

A „Zwischen Gentrification und Abwärtsspirale” (DfG) projektben az év során egy Budapest környéki lakópark (Magdolna-negyed) vizsgálata volt a fő feladat, szakértői és lakossági interjúk formájában. A kutatás egyebek közt fényt derített a lakóparki beruházás körülményeire, az abból fakadó konfliktusokra, a lakóparkban élők társadalmi körülményeire és egymáshoz, valamint a helyi önkormányzathoz fűződő viszonyaikra. Az eredmények szintézisbe foglalják a poszt-socialista nagyvárosok belső differenciálódását, ezen belül kimutattuk Budapest városrégióján belül a fel-, ill. leértékelődő övezeteket, a lakosság és a gazdaság által preferált városnegyedeket. Mindezek hasznosíthatósága a városfejlesztésben (ezen belül Budapest városfejlesztési stratégiáiban) megkérdőjelezhetetlen.

Regionális földrajzi kutatási eredmények

Az MTA Elnökség által 2005-ben kezdeményezett intézeti atlasz-sorozaton belül megtörtént a „Magyarország térképekben” c. kiadvány szerkesztése. Az év végre 90%-ban elkészült atlasz az általuk 2009-ben kiadott „Hungary in Maps” átdolgozott, új fejezetekkel kibővített, aktualizált kézírata, mely tartalmazza a 2008. évi világválságnak a magyar gazdaságra-társadalomra gyakorolt hatásainak térképi megjelenítését is. A maga nemében egyedülálló kiadvány egyesíti a Magyarországról az elmúlt évtizedekben megjelent ország-ismertető könyvek és atlaszok erényeit, és elsősorban a magyar közvélemény, államigazgatás tájékoztatását szolgálja, illetve a felsőoktatás igényeit hivatott kielégíteni. Ezen alkotás a neves szerzői csapatnak köszönhetően világos, mesteri és átfogó áttekintést nyújt napjaink Magyarországról a földrajz, demográfia, közgazdaságtan, történelem, geofizika, földtan, hidrológia, meteorológia, talajtan és más földtudományok terén született legújabb kutatási eredmények bemutatásával. Az áttekinthető, hiteles magyarázó szöveggel kísért, 200 színes térkép, ábra, valamint 57 táblázat nagyszerűen tükrözi Magyarország jelen állapotát.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet osztályainak kutatómunkái több – a hazai társadalmat is foglalkoztató – kérdést is érintettek, amelyekkel kapcsolatban a tudományos szintéren kívül az ország szélesebb nyilvánosságát is tájékoztatták a helyi és országos média segítségével. A következőkben csupán a legnagyobb sajtóérdeklődést kiváltó projektek, kiadványok társadalmi kommunikációjáról ejtünk szót.

„Az árkos erózió szerepe Magyarország jelenkori felszínfejlődésében” OTKA projekt a szélsőségesen csapadékos évek betudhatóan 2010-ben külön aktualitást nyert. A jelentős mértékű vízmosásképződés, -növekedés következtében gyorsan fejlődő vízmosások esetenként lakóházakat és utakat is fenyegettek, ezért meglehetősen nagy médiafigyelem irányult rájuk. A vonalas erózió témakörében végzett kutatások szűkebb mintaterületén, Somogybabodon országos látványossággá vált az egyik vízmosás. E tény felhasználva ismeretterjesztő cikket jelentettünk meg a vízmosásokról és az ellenük való védekezésről. A Földgömb című folyóiratban. Somogybabodon a lakossággal és az Önkormányzattal évek óta kapcsolatban állnak a kutatás résztvevői.

A SOWAP projekt keretében végzett mérések és a kutató állomás fenntartásának egyik fő célja bemutatni a talajkímélő művelésről és a környezetbarát mezőgazdaságról a szakembereknek, a médiának, továbbá magyar és EU-s döntéshozóknak. Ezekről az eseményekről számos újságcikk, TV híradás jelent meg az év során (négy riport a Duna TV agrárműsorában, egy az ATV-n, több újságcikk a Zalai Hírekben illetve két on-line portálon elérhetőek riportok a projektről).

A Geomorfológiai Osztály munkájának egyik kiemelt feladata a stratégiai jellegű geomorfológiai kutatások végzése, például a paksi atomerőmű üzemidő meghosszabbításában való közreműködés, az ár- és belvízvédelem jövőképe, a közútkárosodások – fagykarakok – okainak és folyamatainak vizsgálata, a magyarországi vörösiszap tározók környezeti állapotjavítása, a kis- és közepes radioaktív hulladék elhelyezés biztonságos kezelésében való közreműködés és mindezeknek a lakossági fórumokon és médiában történő közzététele. A kutatási eredmények a Miniszterelnöki Hivatal és a Magyar Tudományos Akadémia közötti tudomány–kormány–társadalom érdekszférájához tartozó kutatási jelentésekben is megjelentek. Az MTA FKI Geomorfológiai Osztálya részt vett a „Vízgazdálkodás a Kárpát-medencében” című kutatási projektben, amely a kormányzat és a tudomány együttműködését szolgálta.

Az „Egészségturizmus és életminőség Magyarországon: az egészségorientált mobilitás társadalmi, gazdasági és környezeti problematikájának földrajztudományi szintézise” című OTKA kutatás eredményei több olyan rendezvényen is bemutatásra kerültek, amelyen a szűkebb tudományos közösségen kívül is voltak résztvevők. Különösen a turizmuspolitikában és a turisztikai vállalkozásoknál dolgozók vettek részt az Új Széchenyi-terv Gyógyító Magyarország–Egészségipar programjának szakmai konzultációján és a Spa-Wellness egészségturisztikai tanácskozáson, ahol az eredmények egy részét bemutatták. A Magyar Rádió Napközben című műsorában is szerepelt a kutatás. Ezen túlmenően hivatalos állásfoglalást készítettek a Nemzetgazdasági Minisztérium számára az Új Széchenyi terv Gyógyító Magyarország–Egészségipar alprogramjához.

Zwischen Gentrification und Abwärtsspirale (DfG) projekt munkájából 2010-ben a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozata keretében egy 15 poszterből álló kiállítás készült „Életterek Kelet-Közép Európában” címmel, amely kiállítás az MTA Aulában 2010. november 9-26 között volt látható a közönség számára. A poszter kiállítás a projekt mellékterméke volt, amely Budapest, Lipcse, Szófia, Szentpétervár és Vilnius lakónegyedeinek változásait vizsgálta. A posztereken helyi lakosok mutatták be saját negyedüket és mondták el, miért szeretnek az adott városrészben élni, milyen átalakuláson ment át lakónegyedük az elmúlt években keresztül. Ennek segítségével nem csupán a kiválasztott lakónegyedek, de a kelet-közép-európai városok hétköznapi életébe és problémáiba is bepillantást kaphattak. A kiállítás részletes leírása megjelent a Pesti Est programfüzetben és számos más nyomtatott és on-line fórum tudósított róla.

Az ACRE projekthez kapcsolódóan 2010. szeptember 27-én Budapesten került megrendezésre a Creaticity című konferencia. A rendezvény célja volt, hogy a gyakorlati szakemberek (várostervezők, államigazgatásban dolgozók) mellett az érdeklődő lakosok számára bemutassa Budapest és a vidéki városaink lehetőségét a kreatív gazdaság fejlesztése terén. A tudományos előadások mellett moderált pódiumbeszélgetésekre is sor került, amelyen a tudományos élet szereplői mellett gyakorló szakemberek is megszólaltak. A konferencián 110 fő vett részt, közöttük érdeklődő városlakók is. A rendezvényről tévéfelvétel és számos rádióinterjú is készült.

„Magyarország kistájainak katasztere” című könyv sajtóbemutatója 2010. szeptember 15-én volt a Magyar Tudományos Akadémián. A kiadványt az MTA elnöke méltatta. Ezt követően a mű iránt olyan jelentős médiaérdeklődés alakult ki, mely napjainkban is tart. Ennek néhány eleme: rádióinterjú a Magyar Katolikus Rádió, Info Rádió, Lánchíd Rádióban. A könyvet bemutatta a Duna Televízió, hosszú cikkben foglalkozott vele a Heti Világgazdaság, illetve folyamatban van két interjú közlése a Magyar Nemzetben és a Somogyi Hírlapban.

2010. szeptember 11-én „A város tíz éve - egy felmérés tapasztalatai” címmel összegezte kutatási eredményeit az intézet munkatársa a Szobi Városnapok keretében.

A kutatóintézet munkatársai rendszeres résztvevői a Magyar Földrajzi Társaság különböző szakosztályai által szervezett tudományos-ismeretterjesztő előadásoknak, melyek célcsoportja elsősorban a hazai földrajz-földtudományi képzésben résztvevő egyetemisták és középiskolai földrajztanárok. 2010-ben öt ilyen előadást tartottak az intézet kutatói.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatóintézet a jövőben tovább szeretné fokozni nemzetközi kapcsolatait, részben új kapcsolatok nyitásával, részben a már meglévők gazdagabb tartalommal való megtöltésével. Ennek keretében törekedett minél több EU projektbe (köztük az EU-7 keretprogramba) való bekapcsolódásra és a nemzetközi pályázatokon való sikeres szereplésre, kihasználva kutatógárdája széles nemzetközi kapcsolatait. Ezek egy része oktatási kapcsolat (egy főmunkatársuk a révkomáromi Selye János Egyetemen, egy pedig a kolozsvári Babeş-Bolyai Egyetemen lát el felsőoktatási feladatokat), de ugyanígy nagy jelentőségűek a különféle társasági, szerkesztőbizottsági tagságok is. Munkatársaik közül hárman vesznek részt hosszabb ideje bizottsági tagként nemzetközi tudományos szervezetek munkájában, 9 fő nemzetközi földrajzi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja. Egy tudományos tanácsadó az ESSC (European Society for Soil Conservation) alelnöke. Az intézet kutatóinak 20 idegen nyelvű tanulmánya jelent meg külföldi szakfolyóiratokban.

A beszámolási évben a kutatóintézet munkatársainak közreműködésével több nemzetközi konferencia, workshop került lebonyolításra. Ezek közül kiemelkedik a „Creativity – A kreatív gazdaságfejlesztési lehetőségei a magyar városokban” című Budapesten, szeptember 27-én megrendezett konferencia, illetve az augusztusban Szombathelyen lezajlott „HUNGEO 2010. Magyar Földtudományi Szakemberek X. Világtalálkozója”.

A külföldi tudományos rendezvények közül a kutatóintézet kutatói a következőkön szerepeltek előadással, posztterekkel, korreferátumokkal, illetve konzulensként: GEOMED 2010 The 2nd International Geography Symposium – Mediterranean Environment (Kemer-Antalya, Törökország); Unesco Chair on Eremology: Workshop and 3rd Conference on Desertification and Land degradation (Gent, Belgium); Soil solutions for a changing world” Proceedings of the 19th World Congress of Soil Science (Brisbane, Ausztrália); IGU Globility Commission Meeting (University of Haifa, Haifa–Izrael); X. Seminario internazionale di geografia medica (Róma, Olaszország); Association of American Geographers, Annual Meeting (Washington D.C., USA). Emellett a nemzetközi projekthez kapcsolódóan a konzorciumi értekezleteken, EU-FP7-es és egyéb külföldi forrásokra pályázó projektek előkészítése során is aktív részt vettek a kutatóintézet dolgozói a nemzetközi földrajzi közéletben.

2010-ben a kutatóintézet nemzetközi kapcsolatai különösen szorosak voltak a Román, az Ukrán, a Horvát, valamint a Szlovák Tudományos Akadémiák földrajzi intézeteivel, a kijevei Sevcsenkó Egyetemmel, a hannoveri Akademie für Raumordnung und Landesplanung-gal továbbá az ungvári, a nagyváradi, a zágrábi, az újvidéki, a lipcsei, a kolozsvári, a berni, és a berlini egyetemekkel, valamint a beregszászi főiskolával. A lipcsei Leibniz Institut für Landerkunde-val 2010-ben szorosabbra fűzték a szálakat: „Weissrussland Aktuell” címmel német-fehérorosz együttműködésben készülő, német nyelvű kiadvány munkálataiban az intézet egy fiatal kutatója vesz részt, míg júniusban négy fiatal kutatót fogadtak Lipcsében egyhetes tanulmányútra és tapasztalatcserére.

E kapcsolatok számos vonatkozásban kötődnek az említett nemzetközi együttműködésben folyó kutatásokhoz, illetve különféle kétoldalú tudományos együttműködésekhez. 2010-ben külön hangsúlyt fordítottak az intézet korábban meglévő, a rendszerváltást követően azonban elhanyagolt keleti kapcsolatainak felélesztésére. Ennek egyik elemeként a Nemzetközi Visegrádi Alap ösztöndíjának köszönhetően a kijevei Sevcsenkó Egyetem egy doktoranduszát fogadta az intézet, míg novemberben egy háromfős delegáció utazott Moszkvába az együttműködés lehetséges jövőbeni formáiról tárgyalni. További sikernek számít, hogy a keleti szakmai (akadémiák közötti) kapcsolatokat Belaruszra is sikerült kiterjeszteni, melynek keretében a két fél között az első találkozó 2010. év végén zajlott le Budapesten.

IV. A 2010-ben elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

„Szob város integrált településfejlesztése” (Szob Város Önkormányzata, 2 millió Ft) c. projekt keretén belül elkészült egy térképes idegenforgalmi kiadvány („Szob, a Börzsöny kapuja”), továbbá a város fejlődését és fejlesztését megalapozó, komplex településföldrajzi tanulmány.

„A határmentiség hétköznapi dimenziói a román–magyar határon.” című projekt a Szülőföld Alap Oktatási és Szakképzési Kollégiumának a „Felnőttképzéshez, szakképzéshez, tehetséggondozáshoz és kutatási programokhoz kapcsolódó hálózatépítési kezdeményezések támogatása a Kárpát-medencében” című kiírt pályázatán nyert támogatást (600 ezer Ft). A kutatás célja főként a bihari határszakaszon annak feltárása, hogy az egyszerűbb határátlépés illetve mindkét ország EU tagsága milyen változásokat hozott a környéken élők, dolgozók illetve az önkormányzatok hétköznapijaiban. A kutatást a Babeş–Bolyai Egyetem Földrajzi Karával együttműködésben végzik.

A „Hungarian Geographical Bulletin” című szakmai folyóirat 2011. évi kiadását a Nemzeti Kulturális Alap Ismeretterjesztés és Környezetkultúra Szakkollégiuma 500 ezer Ft-al támogatja.

A „Magyarország térképekben” című atlaszmű magyar nyelvű kiadását az MTA Elnökség 4 millió, a Nemzeti Kulturális Alap Ismeretterjesztés és Környezetkultúra Szakkollégiuma 1 millió Ft-tal támogatta.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Becse A, Mezősi G, Ádám L, Juhász Á, Marosi S, Somogyi S, Szilárd J, Ambrózy P, Konkolyiné Bihari Z, Király G, Molnár Zs, Bölöni J, Csiky J, Vojtkó A, Rajkai K, Tóth G, Tiner T, Michalkó G, Keresztesi Z, Dövényi Z (szerk.): Magyarország kistájainak katasztere. Budapest: MTA FKI, (2010) 876 (ISBN:978-963-9545-29-8)

2. Egedy T, Kovács Z: Governance, strategies and policies in the Budapest Metropolitan Region: how to enhance the city's competitiveness. Amsterdam: University of Amsterdam, (2010) 66 (ACRE report ; 10.4) (ISBN:978-94-90312-28-2)
3. Erőss Á, Tátrai P: Ethnic features of symbolic appropriation of public space in changing geopolitical frames.: the case of Oradea/Nagyvárad. Hungarian Geographical Bulletin, 59:(1) 51-68 (2010)
4. H Kérdő K, Schweitzer F: Előszó. In: H Kérdő K, Schweitzer F (szerk.): Aquincum: ókori táj - ókori város. Budapest: MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, (2010) 7-9. (Elmélet - módszer - gyakorlat; 66.) (ISBN:978-963-9545-32-8)
5. Karácsonyi D: Ukrajna vidékföldrajza. Budapest: Trefort Kiadó, 209 (2010) (Társadalom- és gazdaságföldrajzi tanulmányok; 4.) (ISBN:978-963-446-586-7)
6. Kertész Á, Jakab G, Madarász B, Órsi A, Pálinkás M (szerk.): Tájökológiai kutatások 2010.: IV. Magyar Tájökológiai Konferencia: Kerekegyháza, 2010. május 13-15. Kerekegyháza, Magyarország, 2010.05.13-2010.05.15. MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, 294 (2010)
7. Jakab G, Kertész Á, Szalai Z: Scale dependence of gully investigations. Hungarian Geographical Bulletin, 59:(3) 319-330 (2010)
8. Kis É, Schweitzer F: Dust accumulation and loess formation under the oceanic semiarid climate of Tenerife, Canary Islands. Hungarian Geographical Bulletin, 59:(2) 207-230 (2010)
9. Kiss EÉ: Területi szerkezetváltás a magyar iparban 1989 után. Budapest; Pécs: Dialóg Campus Kiadó, 223 (2010) (Studia Regionum; Dialóg Campus Szakkönyvek) (ISBN:978-963-9950-26-9)
10. Martin-Brelot H, Grossetti M, Eckert D, Gritsai O, Kovács Z: The spatial mobility of the 'creative class': a European perspective. International Journal of Urban and Regional Research, 34:(4) 854-870 (2010)
11. Michalkó G: Boldogító utazás: a turizmus és az életminőség kapcsolatának magyarországi vonatkozásai. Budapest: MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, 119 (2010) (ISBN:978-963-9545-28-1)
12. Tátrai P: Az etnikai térszerkezet változásai a történeti Szatmárban. Budapest: MTA FKI, 242 (2010) (Elmélet - Módszer – Gyakorlat; 65.) (ISBN:978-963-9545-27-4)
13. Tiner T: Spatial diffusion of mobile telephony in Hungary. Hungarian Geographical Bulletin, 59:(1) 35-50 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Földrajztudományi Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	45	Ebből kutató ² :	23
PhD, kandidátus:	8	MTA doktora:	6
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			5

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :		155
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :		137
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	12
	idegen nyelven:	16
külföldi folyóiratban	magyarul:	0
	idegen nyelven:	14
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0
	idegen nyelven:	3
Könyv ⁸	magyarul:	6
	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	32
	idegen nyelven:	10

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	2,1	Összes független hivatkozás száma:	441
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	441		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :		31	
	posztterek száma:	5	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :		13	
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	39
Diplomamunka (MSc):	9	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	160,84	MFt		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	3	Teljes saját bevétel:	74,25	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		6		
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	8,26	MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:		1		
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,0	MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		1		
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	8,02	MFt	
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:		6		
EU forrásból:	5	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	14,53	MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	16,27	MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		27,34	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 2010-ben

Az intézeti kutatómunka középpontjában a geodézia, a geofizika és a szeizmológia területéhez tartozó alapkutatások végzése, terepi és laboratóriumi megfigyelések adatainak tudományos feldolgozása, értelmezése és közzététele áll. Az alapkutatási tevékenység részét képezi a szakterület elméleti és gyakorlati (matematikai, fizikai) módszereinek, vizsgálati eszközeinek (műszerek) fejlesztése, létrehozása. Az alapfeladatok körébe tartozik továbbá az országos szeizmológiai hálózat és szolgáltatás működtetése, a szilárd Föld és a Föld körüli térség (geodinamika, geomágneses tér, aeronómia) folyamatos obszervatóriumi megfigyelése és a nemzetközi hálózatokban az együttműködésekkel járó adatszolgáltatási feladatok ellátása, időszakos megfigyelőrendszerek működtetése. Az intézet alapkutatási tevékenységével összefüggésben részt vállal természeti kockázatok felmérésében, megelőzésében és az európai kritikus infrastruktúra védelmének kutatásában is.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Geodéziai Főosztály

Geomatematikai kutatások

A természetben, így a geodéziában is fennálló összefüggések, törvények többségükben nemlineáris egyenletekre vezetnek, amelyeket általában linearizálva, iterációval szokás megoldani. A számítógépes algebrai rendszerek elterjedésével a geodéziában is lehetőség nyílik arra, hogy bizonyos esetekben a nemlineáris problémákra egzakt, korrekt megoldásokat adjanak. Ennek megfelelően:

Megmutatták, hogy a kiegyenlítő egyenes un. totális legkisebb négyzetek módszere szerinti levezetése a nemlineáris Gauss-Helmert Modell megoldásával egyenértékű eredményeket szolgáltat. Ezzel azt is igazolták, hogy a szakirodalomban a GHM-ekre korábban elterjedt levezetések hiányosak voltak.

Monte-Carlo szimulációval megvizsgálták, hogy milyen hatása van annak, ha a lineáris regresszió alkalmazásánál nem a megfelelő sztochasztikus modellt használják. Eredményül bebizonyosodott, hogy a totális legkisebb négyzetek módszere szolgáltatja a legpontosabb megoldást.

Megalkották a 3D, 7 paraméteres Helmert-féle dátum transzformációs probléma nemlineáris megoldásának kiegyenlítési modelljét.

Megmutatták, hogy súlyponti koordináták bevezetésével mód nyílik az eltolási paraméterek eliminálására. A $3n$ egyenletből álló egyenletrendszer speciális tulajdonságait kihasználva a forgatási paramétereket is kiküszöbölték, így az eredeti problémát a méretarány tényező megoldására vezették vissza.

Teljesen új levezetést adtak a 3D, 7 paraméteres Helmert-féle transzformáció megoldására. A méretarány tényező meghatározása után a feladatot lineárisra redukálták, és megadták a lineáris probléma kiegyenlítő számítási modelljének megoldását. A numerikus megoldás előállítására számítógépes programot írtak.

A fotogrammetriában használatos külső tájékozási feladatnak egy új, általános, direkt matematikai levezetését adták, amely megoldási módszer összhangban van a 3D, 7 paraméteres Helmert-féle transzformáció megoldásával, de annál lényegesen bonyolultabb. Az általuk kidolgozott eljárás alkalmazása gyakorlati feladatokban is alkalmazhatónak bizonyult.

Műszertechnikai kutatások

2010-ben volt 20 éves a Sopronbánfalvi Geodinamikai Observatóriumban üzemelő extenzométer és az általa nyert adatsor az egyik (talán az egyedüli) leghosszabb összefüggő regisztrátum. Ebből az alkalomból összefoglalták a műszer fejlesztésével, kalibrálásával kapcsolatos eredményeket és új eljárást dolgoztak ki a Föld – observatórium – műszer rendszer átviteli tulajdonságainak vizsgálatára, ill. a rendszer kalibrációjára.

Különböző időfüggvényű, kis elmozdulások laboratóriumi előállítására alkalmas berendezést fejlesztettek ki, abból a célból, hogy szimulálják a földcsuszamlás-veszélyes területeken előforduló, hirtelen bekövetkező, igen kicsi elmozdulásokat. Azt vizsgálták, hogy ezek a kicsi elmozdulások, hogyan választhatók ki a háttérzajból.

Geodinamikai kutatások

A 20 éves hosszúságú extenzométeres adatsorból kimutatták, hogy a tektonikai mozgássebesség nem állandó, hanem változik. Erre vonatkozó adatokat eddig a szakirodalomban nem találtak.

Neurális hálózaton alapuló matematikai módszert dolgoztak ki az extenzométeres adatok barometrikus korrekciójára. A kifejlesztett módszer a korábbiakénál jobb eredményeket szolgáltat.

Kimutatták, hogy a sopronbánfalvi gravimetriai árapálymérések egyik legdominánsabb természetes zajforrása az Észak Atlanti Óceáni térség vizeinek hullámzása. Amíg viharmentes napokon a háttérzaj szórása kisebb mint $\pm 2 \mu\text{Gal}$, addig 10 m magas szignifikáns hullám magasság ill. nagy kiterjedésű vihartevékenység esetén ez megnőhet $\pm(5-10) \mu\text{Gal}$ -ra is.

Megállapították, hogy a graviméterrel mért árapály regisztrátumokban több mint 15 perces átlagos fáziskésés mutatkozik az elméleti modellhez viszonyítva. Ennek nagy része valószínűleg műszerfüggő, és a szélső pontosságú ($\leq \pm 5 \mu\text{Gal}$) gravimetriai mérések során, az árapály korrekciók számításánál figyelembe veendő. A bázismérések időkülönbségétől függően ugyanis akár $\pm 10 \mu\text{Gal}$ nagyságrendben módosíthatja a mérési eredményeket.

A szabatos geodéziai mérőállomások méréseinek 3D integrált kiegyenlítéséhez technikai eszközöket terveztek, mérési és előfeldolgozási módszereket fejlesztettek ki a $\sigma = 0,3 \text{ mm}$ terepi pontosság, mint technológiai küszöbérték eléréséhez.

A módszert a dunaszekcsői Duna-partfal mozgásainak vizsgálatánál alkalmazták. Kimutatták, hogy az utómozgások még mindig tartanak, és a leszakadt területtől délre a mozgások továbbterjedésére lehet számítani. Lehatárolták azt a területet ahol 10 mm/év, vagy annál nagyobb vízszintes és magassági változások várhatók a 2010 évi mérések alapján.

Geofizikai Főosztály

A Geofizikai Főosztály kutatási feladatai a Föld magjától a magnetoszféra határáig terjedő térrészre terjednek. A korábbi sikereken, iskolateremtő hagyományokon alapul az elektromágneses mélyszerkezetkutatás, a felszínközeli elektromágneses módszerek fejlesztése és leképezési tulajdonságainak vizsgálata, légköri elektromos jelenségek vizsgálata, a geomágnesség és a Föld plazmakörnyezetének (ionoszféra, magnetoszféra) kutatása. A kutatások fontos bázisát jelentik az MTA Széchenyi István Geofizikai Observatórium adatai, illetve azok az adatok, melyek az observatórium széleskörű nemzetközi adatszolgáltatása révén válnak elérhetővé. A társadalmi igényekhez és nemzetközi trendekhez, pályázati lehetőségekhez való folyamatos alkalmazkodás révén a globális változásokkal, az üridőjárással és -klímával kapcsolatos interdiszciplináris témák erősödtek fel.

Geofizikai mélyszerkezetkutatás

Elektromágneses (magnetotellurikus) térképezést végeztek a csomádi vulkáni hegységrendszer területén (Tusnádfürdő). A mérés a vulkáni tevékenységből adódó magmakamra oldalirányú kiterjedésének, illetve a korábbi geofizikai mérésekből ismert, a felső köpeny legfelső részén detektált szeizmikusan kis sebességű zóna esetleges meglétének igazolására irányult. A fiatal vulkáni tevékenységgel jellemezhető területen a Csomád-hegység alatti mélyszerkezeti viszonyok ellenállás-eloszlását sikerült 1D inverziós feldolgozással leírni. Különös figyelmet fordítottak a keresett földkéregbeli magmakamra maradványának (kristálykása test) kimutatására, valamint a felső köpeny felső részén várt részlegesen olvadt zóna jelenlétére. A mérések 1D-os eredményei igazolták a vulkáni kráter alatt kb. 6–8 km mélységben elhelyezkedő, DNy-i irányban elhúzódnó jól vezető zónát.

Összefoglalták a mágneses fázisátalakulás kutatásának (68473-as NKTH-OTKA projekt) eredményeit és a Magyarország területén valószínűsíthető ilyen jellegű anomáliákat. Hiteles laboratóriumi mérések hiányában (amilyenekre nincs technikai lehetőség) sajnos nem lehet eldönteni, hogy a jelenség ténylegesen előfordul-e a természetben. Az biztos, hogy amennyiben igen, úgy az a mélyszerkezetre vonatkozó eddigi értelmezések újragondolását igényli.

Felszínközeli geofizikai módszerek

Vizsgálták a repedésrendszerek repedésirányainak meghatározására használt rutineljárást, a Schlumberger elrendezéssel végrehajtott azimutális mérési technikát. Fizikai modellezéssel kimutatták, hogy a repedések irányai csak nagy bizonytalansággal határozhatók meg. Kimutatták továbbá, hogy a repedésrendszert fedő réteg vastagságának növekedésével a módszer hatékonysága tovább romlik. Amennyiben azonban nem élünk az anizotrópia paradoxon feltételezésével, akkor a fedőréteg vastagságának növekedésével a módszer hatékonysága nő. Ezekből a vizsgálatokból arra a következtetésre jutottak, hogy a repedésrendszerek irányának meghatározása egyetlen azimutális méréssel legjobb esetben is csak az anizotrópia paradoxon jelensége fellépési feltételeinek tisztázásával oldható meg. Ha azonban az adott területen több mérést kiviteleznek, akkor a repedések irányai statisztikailag meghatározhatók és a mérések még ebben az esetben is kisebb idő-, és anyagi ráfordítást igényelnek, mintha hasonló célú vizsgálatokat a konkurens aquifer vizsgálatok segítségével végeznének el.

Vizsgálták, hogy a különböző modellek és elrendezések esetére előremodellezéssel számított, majd különböző nagyságú zajjal terhelt és invertálással meghatározott kép mennyire hasonlít az eredeti modellhez. Meghatározták, hogy a vizsgált modellek esetében melyek a legjobb

elrendezések, illetve, hogy *a priori* ismeretek hiányában a pól-dipól, a Wenner-, vagy a Stummer elrendezésekkel a legcélszerűbb végrehajtani a méréseket. Kimutatták, hogy számos esetben (és minden egyes modellnél van ilyen eset) a zajjal terhelt adatok inverziója jobb eredményt adott, mint a zajjal nem terhelt adatok inverziója.

Légköri elektromos jelenségek

Folytatták a Schumann-rezonancia (SR) adatok előfeldolgozó rendszerének fejlesztését: tökéletesítették a „boxcar-averaging” módszeren alapuló újramintavételező eljárást, melyet több napnyi adatsoron sikerrel teszteltek. Az ennek eredményeként kapott előfeldolgozott idősorok az „SR adatok globális inverziója” nemzetközi együttműködés keretében hasznosulnak.

Nemzetközi együttműködés keretében vizsgálták egy ritka légköri elektro-optikai emissziótípusnak, az óriás nyalábnak (gigantic jet) téli mediterrán zivatar fölött, kis felhőtető magasságnál elsőként megfigyelt esetét. A megfigyelt emisszió magán hordozta a jelenségtípus morfológiai jegyeit és időbeli fejlődésének jellegzetességeit. Az óriás nyaláb nem csak a szülő zivatar jellegét tekintve volt egyedi, hanem abból a szempontból is első megfigyelés volt a maga nemében, hogy a szülő zivatarfelhő pozitív töltésgócából pozitív töltést szállított a földhöz képest általában pozitív töltésű ionoszférába. A töltésáramlás irányát több megfigyelőállomáson, különböző frekvenciasávokban folytatott elektromágneses mérések összevont elemzésével sikerült egyértelműen megállapítani.

Magnetosféra, ionoszféra

A CLUSTER és THEMIS műholdak adatait felhasználva a mágneses csóvában lejátszódó fizikai folyamatokat vizsgálták többműholdas és többműszeres módszerekkel. A szubviharokkal összefüggésbe hozható dipolarizációs frontok tulajdonságait, a centrális plazmalepel instabilitásait, a Föld felé irányuló gyors plazmajetek dinamikáját ill. fékeződését, valamint a földközeli plazmalepelben megfigyelhető részecskegyorsítási jelenségeket kutatták.

Az FLR típusú pulzációknak a plazmasféra elektronsűrűség eloszlására történő alkalmazásával foglalkozó tanulmány legfontosabb eredménye, hogy a pulzációk előfordulási gyakoriságának a spektruma alapján az elektrotechnikából ismert rezgőkör analógiájára meghatározhatjuk az FLR típusú pulzációk periódusát. Az 1957 és 1973 közötti adatok alapján azt találták, hogy a naptevékenységi maximumok időszakában a plazma a tükörpont fölötti magasságtartományban összpontosul, míg a naptevékenységi minimumok időszakában egyenletesebb a plazmaeloszlás. A másik eredmény a FLR típusú pulzációk előfordulási gyakoriságában talált téli anomália, az előfordulás erős csökkenése a plazmasűrűség növekedésével áll kapcsolatban, amely a rezgőkör analógia alapján magától értetődőnek mutatkozik (növekvő ohmikus terhelés).

Geomágnesség

A földi lökéshullám előtti turbulens térségben található energikus ionok viselkedését diffúziós transzport egyenlettel lehet leírni. A Cluster műholdak többpontos szimultán mérési adatainak a vizsgálatával bizonyították a diffúziós elmélet helyességét az alacsonyabb, 10–32 keV energiájú ionok esetében, majd a vizsgálatot kiterjesztették a 30–160 keV energiatartományra is. Összehasonlítva egy közepes napszél-sebességű és két magas napszélsebesség értékű esemény adataiból számított fizikai paramétereket, kiderült, hogy a diffúziós folyamatok alapvetően különböznek. Az ionok szóródását alapvetően befolyásolták olyan mágneses hullámok, amelyek képződését nagymértékben elősegítette az esemény alatt tapasztalt

szokatlanul stabil irányú bolygóközi mágneses tér. Az eredmények alapján kijelenthető, hogy sikerült egy eddig ismeretlen fizikai folyamatra utaló döntő bizonyítékot találni.

A felszíni elektromágneses impedanciatenzor széles spektrális tartományra vonatkozó hosszú távú periodikus változásainak viselkedését tanulmányozták a MTA Széchenyi István Geofizikai Observatórium közel 50 éves geomágneses és tellurikus regisztrátumán. Az EM impedanciatenzor amplitúdójának 27 napos változásához tartozó, 2–120 perces periódustartományra vonatkozó spektrális eloszlásában extrém modulációs amplitúdójú frekvenciákat azonosítottak.

Megalkották a magnetoszférikus Pc5 pulzáció-források egy ionoszférikus forrás-modelljét, amelyre vonatkozólag levezették az elméleti felszíni elektromágneses impedanciatenzor formuláját. Elvégezték a megfigyelésből adódó adatok és az elméleti modell illesztését.

Interdiszciplináris témák

EURISGIC néven finn, brit, svéd, orosz, amerikai, magyar konzorcium meghatározó tagjaként FP7-es pályázatot nyertek. Az intézetre eső fő feladatok az öt napciklusra kiterjedő tellurikus aktivitás elemzése, valamint a geomágneses indukció számítására alkalmas európai vezetőképesség-eloszlás térkép szerkesztése. A pályázat az alapkutatási feladatok mellett az európai kritikus infrastruktúra védelmét is szolgálja.

A GPS mérések feldolgozásánál eredményként a megfigyelési pont földrajzi koordinátái szerepelnek. A mért koordinátaértékeknek az átlagtól való eltéréseit koordináta reziduáloknak nevezik. Ezeknek a reziduáloknak az elemzése során azt tapasztalták, hogy azok időbeli változása a planetáris hullámoknak megfelelő periódusú ingadozásokat mutat.

Szeizmológiai Főosztály

Observatóriumi eredmények

A szélessávú Nemzeti Szeizmológiai Hálózat fejlesztése: a Földrengésjelző Observatóriumban működő szeizmológiai adatközpontban az állomáshálózat felügyeletét, az adatátvitelt, illetve az adatok elsődleges feldolgozását végző SeisComP3 szoftver újabb verzióját telepítették. E programcsomag fogadja a hazai és külföldi állomásokról valós időben érkező adatokat és automatikus hipocentrum meghatározást is végez. Az új verzió földrengés esetén hangos (szóbeli) riasztást ad ki és a megadott címekre e-mailt küld. 2010-ben mintegy 5883 hazai kimérési adat keletkezett. Ezen mérési adatok, valamint a külföldről kapott mintegy 170 ezer fázisadat alapján 196 hazai földrengés ($0,5 \leq ML \leq 3,2$) és 78 robbantás hipocentrumát határozták meg. Közel 2500 olyan szeizmikus esemény keletkezett 2010-ben, melyek észleléséhez a magyar állomások adatait is felhasználták. Megszerkesztették és megjelentették a 2009. évi földrengés-bulletint. 2010-ben Magyarország területén tizennégy olyan földrengés keletkezett, amelyek makroszeizmikus adatfeldolgozást (intenzitás-becslést) tettek lehetővé.

Földrengés-kockázat

Elkészült Budapest és közvetlen környezetének – a helyi geológiai viszonyokat is figyelembe vevő – részletes valószínűségi földrengés-veszélyeztetettség térképe. A helyi geológia hatásának figyelembevétele az Eurocode 8 földrengés-biztonsági szabvány általaj kategóriái alapján történt. A talajkategória térképet térképi és geológiai információk, fúrásadatok, korábban és a jelenlegi kutatás keretében végzett geofizikai mérések, valamint műholdas topográfiai adatok szintézisével határozták meg. Az üledékek rezonancia frekvenciájának meghatározására a terület közel 60 pontján végeztek mikroszeizmikus zajméréseket. Az átlagosnál magasabb talajvízszintek intenzitásnövelő hatását is figyelembe vették. A kapott

250 év visszatérési periódusra számított veszélyeztetettségi térkép szerint a területen várható intenzitás az EMS skálán 5,5 és 7 fok között változik. A legkisebb veszély a Duna jobb partjának idősebb kőzetkibúvákat jellemzi. Általában nagyobb a veszélyeztetettség a keleti és a déli területeken. A kutatás részeredményeinek felhasználásával elkészítették Budapest 475 éves visszatérési időre számított, talajviszonyokat is figyelembe vevő, vízszintes gyorsulás értékekben megadott, valószínűségi földrengés-veszélyeztetettségi térképét is.

Elméleti kutatások

A hazai földrengések fészekmechanizmusának meghatározása terén az első beérkezések polaritását hasznosító eljárással két közeli rengés mechanizmusát sikerült kiszámítani. Egy korábban kifejlesztett, probabilisztikus megközelítést alkalmazó programcsomag segítségével azonban lehetőség nyílt arra, hogy a teljes hullámformák inverziójával számos olyan rengés fészekmechanizmusának (momentum tenzorának) a meghatározására is sor kerüljön, amelyek esetén a klasszikus módszerek nem működnek. Több, a polaritás adatokon alapuló módszerrel már meghatározott fészekmechanizmus pontosítása is megtörtént. A becsült fészekmechanizmusok összhangban vannak az epicentrális területekre jellemző, a szakirodalomban publikált feszültségtér fő irányjaival. A vizsgált események mechanizmusa vagy tiszta oldal-eltolódással, vagy oldal-eltolódás és inverz vető kombinációjával írható le, ami arra utal, hogy hazánkban a feszültségtér kompressziós jellegű. A fészekparaméterek vizsgálatát a szeizmogramok spektrális elemzésével is elvégezték. A spektrum alakját leíró paraméterekből becsülhető a rengés fészében történő átlagos elmozdulás, az elmozdulást elszenvedő felület nagysága, a bekövetkező feszültségcsökkenés és a rengés momentuma. Megállapították, hogy a vizsgált kis magnitúdójú eseményeknél a növekvő szeizmikus momentum, növekvő feszültségcsökkenéssel jár együtt. A kapott eredmények alapján lineáris összefüggést állítottak fel a lokális magnitúdó és a momentum magnitúdó között. A kis méretű, kis epicentrális távolságban regisztrált események spektrumai segítségével meghatározták a felszínközeli csillapodás mértékét is (kappa érték), melynek mértéke országos átlagban 0,030 s-nak adódott.

Geodinamika

A földköpenyben zajló áramlások modellezése során a hőoszlopok termikus szerkezetét és felszíni megnyilvánulásait (topográfia, geoid) vizsgálják a bemenő paraméterek szisztematikus változtatásával. A SEE-GRID-SCI projekt keretében az általuk használt program futtatása a SEE-GRID hálózaton történt. A P-GRADE grid portál 'Parameter study' eszközének segítségével szisztematikus modellfuttatásokat végeztek. Megállapították, hogy a földköpeny különböző viszkozitású rétegeinek (asztenoszféra, litoszféra, D" réteg) figyelembevételével lehetséges a szeizmikus tomográfia által jelzett hőmérséklet-anomáliájú hőoszlopok modellezése. Ugyanakkor a hőoszlopok felett kialakuló topografikus anomália (a hotspot-hátságok magassága) megfelelő modellezéséhez elengedhetetlen a viszkozitás hőmérséklettől való függésének figyelembevétele. Az 1900–2007 közötti időszak $M_w \geq 7,0$ földrengéseinek 1719 eseményt tartalmazó katalógusa alapján vizsgálták a felszabaduló energia sugár menti eloszlását. Két maximumot találtak: ~30 km-ben (innen származik a szeizmikus energia 90%-a), és az 550–670 km közötti mélység tartományban. A földrengés-energia felszabadulási csúcsok segítségével kimutatták, hogy a köpenybe hatoló litoszféra lemezek a mélység felé haladva általában görbülnek. Két független forrásból származó paleogeográfiai térképsorozat felhasználásával sikerült megállapítaniuk, hogy a földtörténet utolsó 500 millió éve során a kontinens–óceán terület arány gyakorlatilag nem változott és, hogy a Fanerozoikum elején a köpenyáramlás intenzitása a jelenleginél 25–30 %-kal nagyobb volt.

Szeizmicitás

A jelenkori szeizmicitás jobb megismerése érdekében az Instituto di Metodologie per l'Analisi Ambientale, Consiglio Nazionale delle Ricerche (IMAA-CNR) munkatársaival közösen vizsgálták a szeizmicitás adatok dinamikus statisztikai tulajdonságait. A *Fano-faktor* (*FF*) módszerrel közel százéves adatsoron végzett elemzések azt mutatják, hogy az intervallum növekedésével az *FF* görbe növekszik, ami korrelált fluktuációt mutat. Alacsony és közepes időszakoknál, kb. ½ évig egy kvázi Poisson viselkedés a jellemző. Hosszabb időszakok esetében azonban meglehetősen magas csoportosodási tulajdonságot tapasztaltak. Az *Allan-faktor* (*AF*) eredmények 2,23 éves periodicitásra utalnak az $M \geq 3,5$ magnitúdójú földrengések esetében. Elemezték a naptevékenység és a szeizmikus aktivitás kapcsolatát is. A Kárpát-medence több mint százéves katalógusa (1900 és 2009 közötti) $M > 3,2$ rengései alapján 0,84 korrelációs együtthatóval kapcsolatot mutattak ki a 11 éves napfoltciklussal. A jelenség elméleti háttere még megoldatlan. Nagyszámú rengések térképi megjelenítéséhez új módszert fejlesztettek ki, melynek során nem az egyes epicentrumokat ábrázolják, hanem a földrengések területi sűrűségét.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Geodézia

A 3D, 7 paraméteres Helmert-féle transzformáció az alapja a koordináta-rendszerek – így a GPS rendszerek – közötti áttérésnek. Erre eddig közelítő, iterációs megoldásokat használtak. Az utóbbi időben megjelentek a szakirodalomban az egzakt, analitikus megoldást adó modellek, de ezek az eljárások az átszámításhoz használt közös pontok számának növekedésével kombinatorikus robbanáshoz vezetnek, azaz a feladat a számítástechnika mai állása mellett sem megoldható. Az általuk adott modell feloldja a problémát.

A Sopronbánfalvi Geodinamikai Observatóriumban folyó két évtizedes extenzométeres mérések eredményei hozzájárulnak a hazánk területén végbemenő recens tektonikai mozgásfolyamatok jobb megismeréséhez. Az eredmények veszélyes ipari létesítmények helyének kijelölése során használhatók fel. A földtani folyamatok által előidézett ipari katasztrófák elkerülését, ill. a károk méretének csökkentését segítik elő.

A 2006-ban befejeződött EU5 OASYS projekt folytatásaként folyó kutatások a dunaföldvári és dunaszekcsői magaspartonokon a földcsuszamlások kinematikai és dinamikai mozgásviszonyainak jobb megértését szolgálják abból a célból, hogy az eredményeket egy korai riasztórendszer kifejlesztéséhez használhassák fel. A mozgások állapotáról rendszeresen tájékoztatják a helyi önkormányzatot, az Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság Baranya megyei Igazgatóságát, valamint a Magyar Bányászati és Földtani Hivatal pécsi kirendeltségét, továbbá együttműködnek a helyi önkormányzat védekezési munkálatainak előkészítésében is.

Geofizika

Az elektromágneses mélyszerkezetkutatás a Kárpát-Pannon régió geotermikus, szeizmikus és geodinamikai viszonyainak megismerését szolgálja. A felszínközeli geofizikai módszerek olyan környezettudományi problémák megoldását teszik lehetővé, mint a felszín alatti vízmozgások, így a lehetséges szennyeződések mozgásának követése, eróziós folyamatok műszeres megfigyelése és előrejelzése.

A napszél és a geomágneses tér közötti kölcsönhatás, valamint a különböző légköri tartományok közötti energiacsatolási folyamatok obszervatóriumi megfigyelése az európai

kritikus infrastruktúra Nap-Föld fizikai folyamatokkal, pl. geomágneses viharokkal összefüggő veszélyeztetettségének vizsgálatában meghatározó jelentőségű.

Az űridőjárás és az űrklíma kutatása a semleges légkörben tapasztalt globális változások pontosabb megértése miatt fontos.

Szeizmológia

A Szeizmológiai Obszervatórium ügyleti rendszerben információkat nyújt a lakosság, a kormányzati szervek, az írott és elektronikus sajtó számára, különösen jelentősebb földrengések kipattanása esetén. A lakossági információk az obszervatórium weblapján keresztül is elérhetők. Hatósági és jogi eljárások során az intézet szeizmológiai szakvélemény készítését vállalja.

Az obszervatórium a 200 éve, 1810. január 14-én, Mór térségében kipattant és jelentős károkat okozó $M = 5,4$ -es földrengésre emlékezve kiállítást és versenyt szervezett a móri Táncsics Mihály Gimnázium tanárai és diákjai segítségével a Lamberg Kastélyban működő Művelődési Központban. A kiállításra szeizmográfot és egyéb kiállítási anyagot vittek és a diákok kérdőívvel keresték meg a lakosságot az esemény kapcsán.

2009-ben hazánkban is életbe lépett az Eurocode 8 földrengés biztonsági szabvány. Az utóbbi években bekövetkezett természeti katasztrófák miatt a biztosítótársaságok is egyre több figyelmet fordítanak a kockázatelemzések eredményeire. Emiatt a földrengés-veszélyeztetettség, a lokális módosító hatások meghatározási módszereinek fejlesztése, a minél pontosabb és megbízhatóbb veszélyeztetettségi térképek elkészítése kulcsfontosságú mind a mérnöki tervezés, mind a, mind a lakosság korrekt tájékoztatása érdekében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Stuttgart University Institute for Photogrammetry: kutatások a fotogrammetria területén
Geodetic Survey Division Natural Resources Canada: 3D, 7 paraméteres Helmert-féle transzformáció geodéziai alkalmazásai
GISIG Genova: térinformatikai kutatások
Pozsonyi Geofizikai Intézet: extenzométeres mérések
Centre d'études des Environnements Terrestre et Planétaires, France: geomágnesség
Lengyel Tudományos Akadémia Geofizikai Intézete, Varsó : mélyszerkezet-kutatás
Lengyel Tudományos Akadémia Űrkutatási Intézet: ionoszonda fejlesztése
Service International des Indices Geomagnetiques: mágneses tranziens események
Max Plank Institut für Extraterrestrische Physik, Németország : Nap-Föld fizika
Laboratoire de Physique et Chimie de l'Environnement et de l'Espace (LPC2E CNRS)
Franciaország: magnetoszféra-kutatás.

Külföldről érkezett vendégkutatók:

Kutatási együttműködés keretében 20 fő vendégkutató összesen 6 hónapot töltött az intézetben.

Intézeti kutatók hosszabb idejű külföldi szakmai munkája:

Posztdoktori ösztöndíjas: 1fő

Kutatási együttműködés keretében 5 fő intézeti kutató összesen 12 hónapot töltött külföldön.

A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység (eseti):

OTDK – zsűritag, bíráló; PhD védés – elnök 2 alkalommal

A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység (rendszeres):

ELTE TTK: 3 elméleti kurzus, 2 gyakorlati kurzus

NyME KTK: 1 elméleti, 1 gyakorlati kurzus (német nyelven)

NyME KTK: 3 elméleti, 3 gyakorlati kurzus

NyME FMK: 6 elméleti, 2 gyakorlati kurzus, (ebből 1 elm., 1 gyak. kurzus angol nyelven)

NyME EMK: 4 elméleti, 2 gyakorlati kurzus

BME Szélessávú Hírközlési és Villamosságtani Tanszék: 2 elméleti kurzus

MAB tag: 1 fő

Külföldi egyetemen végzett oktatási tevékenység:

BBTE, Kolozsvár: 1 elméleti kurzus, 1 gyakorlati kurzus

Doktori iskola vezetése: NYME Kitaibel Pál Doktori Iskola, Geokörnyezettudomány

Doktori iskolában törzstag:

NyME EMK Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola, 3 fő

NyME KTK Széchenyi István Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola, 1 fő

NyME FMK Cziráki József Faanyagtudomány és Technológiák Doktori Iskola, 1 fő

Doktori iskolában oktatás:

NYME Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola: Geodinamikai folyamatok modellezése, A tudományos kutatás módszertana, Naptevékenység és időjárás, Geomágnesség, Űridőjárás és klíma.

NyME Cziráki József Faanyagtudomány és Technológiák Doktori Iskola: Méréselmélet, Digitális képfeldolgozás.

NYME KTK Széchenyi István Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola: Statisztikai elemzések elmélete.

Témavezetés (TDK-dolgozat):

BME úrkutatás: 2 fő

NYME környezettudomány: 2 fő

Témavezetés (BA, BSc diploma):

ELTE, fizikus: 1 fő

Témavezetés (MA, MSc diploma):

NYME, informatikus : 1 fő

NYME, környezetkutató : 1 fő

Témavezetés (PhD disszertáció):

ELTE Földtudományi Doktori Iskola: 1 fő

PTE: Földtudományi Doktori Iskola 1 fő

NYME (EMK, KTK, FMK): 12 fő

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA K-81295 „Mérési módszerek kifejlesztése nagyon kicsi felszíni tömegmozgások kimutatására”, időtartam: 2010-2014.

NIIFP: „Számítóközpont fejlesztése”

TÁMOP4.2-1: „A felsőoktatás minőségének javítása a kutatás-fejlesztés-innováció-oktatás fejlesztésén keresztül” pályázat keretében a „Biotikus és abiotikus környezetek vizsgálata és kutatómódszertana” IV. Alprogramban „A földtani környezet komplex biztonsági értékelése és a károk elhárításának stratégiája” kutatási téma.

EU FP7, Grant agreement No: 260330, “European Risk from Geomagnetically Induced Currents, Status: Participant (WP leader), 2011-2014.

Szerződéses vállalati kapcsolatok

OMV Onshore Exploration GmbH: EM (transient and MT soundings) and gravity research;

Allianz Hungária Zrt.: Budapest és közvetlen környezetének földrengés-veszélyeztetettsége konkrét talajadottságok alapján.

Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE TTK FFI Közöttani-Geokémiai Tanszék: Magnetotellurikus mérések végzése a csomádi (Erdély) kutatási területen.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bencze P, Lemperger I: Characteristics of field line resonance type geomagnetic pulsations and variations of plasmaspheric plasma density distribution. *Advances in Space Research*, 47: JASR10436. (2010), DOI: 10.1016/j.asr.2010.12.016.
2. Kiszely M: Statistical analysis of earthquakes and quarry blasts in the Carpathian Basin – New problems and facilities. *Carpathian Journal of Earth and Environmental Sciences*, 5:(2) 101 – 110 (2010)
3. Kozlovsky M, Balaskó Á, Süle B: Numerical modeling of mantle convection in 3D on the SEE-GRID-SCI infrastructure. *Earth Science Informatics*, 3: 229-237 (2010), DOI 10.1007/s12145-010-0070-3.
4. Mentés G: Quartz tube extensometer for observation of Earth tides and local tectonic deformations at the Sopronbánfalva Geodynamic Observatory. *Review of Scientific Instruments*, 81: 074501-1 - 074501-6 (2010), DOI:10.1063/1.3470100.
5. Riguzzi F, Panza G, Varga P, Doglioni C: Can Earth's rotation and tidal despinning drive plate tectonics?. *Tectonophysics*, 484:(1-4) 60-73 (2010), DOI: 10.1016/j.tecto. 2009. 06.012
6. Újvári G, Kovács J, Varga Gy, Raucsik B, Marković S B: Dust flux estimates for the Last Glacial Period in East Central Europe based on terrestrial records of loess deposits: a review. *Quaternary Science Reviews* 29: 3157-3166 (2010)
7. van der Velde OA, Bór J, Li SA, Cummer E, Arnone F, Zanotti M et al.(4): Multi-instrumental observations of a positive gigantic jet produced by a winter thunderstorm in Europe. *J. Geophys. Res.* 115:(D24301) 17 (2010), DOI:10.1029/2010JD014442.
8. Varga P, Denis C: Geodetic aspects of seismological phenomena. *Journal of Geodesy*, 84:(2) 107-121 (2010), DOI: 10.1007/s00190-009-0350-1

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	64	Ebből kutató ² :	34
PhD, kandidátus:	13	MTA doktora:	5
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			6

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			109
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			104
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	8	idegen nyelven: 3
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 25
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 12
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 1
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	1	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	18,62	Összes független hivatkozás száma:	214
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	328		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			12
		posztterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	4		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			12
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	14

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	251,59	MFt		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	3	Teljes saját bevétel:	53,38	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			7	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	27,4	MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2	
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	9,19	MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt	
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1	
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4,45	MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			26,7	MFt

GEOKÉMIAI KUTATÓINTÉZET

1112 Budapest, Budaörsi út 45.
telefon/fax: 1-319 3137
e-mail: demeny@geochem.hu; honlap: www.geochem.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatóintézet 2010-ben is folytatta a litoszféra anyagának, folyamatainak jobb megismerését célzó azon alapkutatásokat, amelyek az intézetben nagy hagyományokkal rendelkeznek és egyben nemcsak a hazai szakmai közvélemény, hanem a nemzetközi tudományos közösség által is elismertek. Ezek az alapkutatások az ásvány-, kőzet-, és fluidum-képződés, az izotóp-geokémia, a környezet-geokémia és a szerves-geokémia területén folytak. Feladatuk a litoszférát felépítő, a geodinamikai folyamatok rekonstrukcióját lehetővé tevő fontos magmás, metamorf és üledékes kőzettípusok és velük együtt előforduló fluidumok képződési folyamatainak pontosabb megismerése volt. Folytatták az egyes hazai ásványi nyersanyagaink képződését, migrációját és felhalmozódását eredményező, illetve befolyásoló geokémiai folyamatok kutatását is. Mind a geokémia belső fejlődése, mind pedig a természetes környezet állapotának megismerése, megőrzése, az életminőség javítása szempontjából egyre nagyobb jelentőségű környezettudományi kutatások keretében folytatták a geoszférákban, illetve azok határfelületein végbemenő geokémiai folyamatok kutatását. Ezek közül elsősorban a múltbéli és jelenkori környezet állapotát és változásait, a nehézfémek körforgalmát, a talajok, valamint a felszíni és felszín alatti vízbázisok, hévizek sajátosságait, valamint az épített környezet és kulturális örökségünk egyes tárgyi emlékeit ért antropogén hatásokat vizsgálták.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

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

Metamorf kőzettani-geokémiai kutatásaik keretében vizsgálták a Szlavóniai-hegység (Horvátország) közepes fokú metamorf kőzeteiben (csillámpala, paragneisz, amfibolit) előforduló, összetett kémiai zónásságot mutató gránátokat. Nemzetközi együttműködés keretében kimutatták, hogy a csillámpalák gránátjai a Kutjevo-völgy szelvényében található lelőhelyen Mn-dús maggal és Ca-dús peremmel rendelkeznek. A Mn mennyisége a magtól a perem felé egyenletesen csökken, ezzel ellentétben a Ca ugrásszerűen megnő. Ezt a jelenséget nem tapasztalták a paragneiszekben és az amfibolitokban, ahol a Ca egyenletesen csökken a magtól a peremig. Kvantitatív fázisdiagramos és gránát összetételi izopletes vizsgálatok segítségével meghatározták a gránát mag keletkezési körülményeit (584-592 °C és 6,4-7,8 kbar). A Ca-dús peremek 600-660 °C és 11-12 kbar között képződtek. A paragneiszből és az amfibolitból hasonló csúcs nyomás-hőmérséklet körülményeket kaptak, de ezek a kőzettípusok nem őrizték meg a korai, kisebb nyomás-hőmérsékletű esemény nyomait. A modellezés alátámasztotta azt a megállapítást, mely szerint a gránát nem volt stabil ezekben a kőzetekben ezeken a nyomás-hőmérséklet viszonyokon. Ellentétben a feltárásból készült publikációkkal, sztaurolitot nem mutattak ki, és H₂O modális (mennyiségi) izopletek segítségével igazolták, hogy a kőzet a retrográd nyomás-hőmérséklet útja során nem haladt át sztaurolit-tartalmú ásványegyütteseket tartalmazó területen. A krndijai lelőhely csillámpalái szintén tartalmaznak zónás gránátokat. Fázisdiagramos vizsgálatokkal meghatározták, hogy a Ca-dús gránát magok 520-630 °C és 7-8 kbar között képződtek. A gránát peremek kisebb Ca-

tartalmúak, és lényegesen kisebb nyomáson keletkeztek andalúzit és sztaurolit társaságában (530-570 °C és 3-4 kbar). A nemzetközi szakirodalom mindkét feltárást ugyanabba a tektono-metamorf sorozatba sorolta. Munkájuk során cáfolták a fenti megállapítást. A krndijai csillámpalák monacitjai variszkuszi korúak (350 millió év), míg a kutjevoiak pre- vagy kora-variszkusziak (440 millió év). A fenti eredmények figyelembevételével egy, az eddiginél összetettebb szerkezeti felépítést és metamorf fejlődéstörténetet vázoltak fel a Szlavóniai-hegység területére, mely egy pre-variszkuszi és egy variszkuszi ciklusból áll.

Az intézetben végzett négy évtizedes metamorf kőzetgenetikai kutatások tapasztalatai alapján folytatták egy metamorf kőzettani kézikönyv szerkesztését és megírását: a metamorf kőzetek és jelenségek korszerű rendszertanát és nevezéktanát magyar nyelven foglalták össze. E munkánál felhasználták a Nemzetközi Földtudományi Unió Metamorf Kőzettani Rendszertani Albizottsága által 2007-ben angol nyelven kiadott kézikönyvet. Az Albizottság egyik nemzetközi munkacsoportjának vezetője, illetve a rendszertani kézikönyv egyik vezető társszerzője az intézet egyik munkatársa volt. A munka hiánypótló lesz a hazai felsőoktatásban és a geológiai kutatómunkában, mivel eddig magyar nyelvű metamorf kőzettani kézikönyv még nem jelent meg Magyarországon.

Magmás kőzettani-geokémiai kutatásaik keretében a stabilizotóp-geokémia segítségével több karbonatithoz köthető fluorittelep genetikájának, képződési körülményeinek meghatározását végezték el. Ezen területen belül 2010-ben új, a nyersanyagkutatásban hasznosítható eredmények születtek az ausztráliai Speewah Dome fluorit-karbonatit lelőhelyének elemzésében. Több, újonnan felfedezett előfordulás vizsgálati eredményei arra utalnak, hogy a fluoritot és karbonatitot tartalmazó átalakulási zónák magmás fluidumok feláramlásának hatására jöttek létre, amely fluidumok jelentős fejlődésen (kőzet/fluidum kölcsönhatás és kigázosodás) mentek keresztül. Világviszonylatban is ritka elemzési adatok alapján kiderült, hogy a jelentős fluoritvagyon (több mint 6 millió tonna) keletkezése genetikai kapcsolatban van a karbonattal, a létrehozó fluidumok azonban a magmás komponens mellett jelentős kéreganyagot is tartalmaznak. A geokémiai adatok és ásványátalakulási folyamatok ismerete a további nyersanyagkutatáshoz nyújt fontos adatokat. Vizsgálták továbbá a szintén ausztráliai Yungul és Wilmott karbonatitok valamint fluoritok genetikáját is. Ezen karbonatitokban található fluidumzárványok hidrogén izotóp mérése valamint a vizsgált mintáknak egyéb geokémiai és kőzettani jellege azt sugallja, hogy a Yungul karbonatit esetében egy „relatív meleg és nedves”, míg a Wilmott karbonatit esetében egy „relatív meleg, de száraz” metasomatikus esemény játszotta a főszerepet. Mindazonáltal a fluoritokhoz kapcsolódó vizsgálatok azt sejtetik, hogy az azt létrehozó fluidum-rezsim eltérő volt a karbonatitokéhoz képest, jöllehet a fluidumok talán közös eredetűek lehettek.

Nemzetközi együttműködés keretében meghatározták egy polikristályos gyémánt (diamondit) mintasorozat gyémántjának N és C izotóparányait, N tartalmát, valamint néhány mintában a N aggregáció mértékét is. Összességében 21 minta került vizsgálatra, amelyek peridotitos és eklogitos összetételű gránátokat tartalmaztak. A polikristályos gyémántokban a mérések szerint a $\delta^{13}\text{C}$ értékek átlaga $-16,9 \pm 7,2$ ‰, a $\delta^{15}\text{N}$ pedig $+11,9 \pm 8$ ‰ volt, és nem mutatkozott különbség a peridotitos és az eklogitos paragenezis között. Ezek az értékek eltérnek mind a monokristályos gyémántokétól, mind a szálas, bevont gyémántokétól, és külön mezőben helyezkednek el a $\delta^{13}\text{C} - \delta^{15}\text{N}$ diagramon. Ennek a „szervesanyag-szerű” izotóp-összetételnek az eredetét két lehetséges módon magyarázták. Az egyik magyarázat szerint a polikristályos gyémántok forrása a szerves, kéreg eredetű szenet és nitrogént tartalmazó szubdukálódott óceáni aljzatról származó fluidumok lehettek, akár közvetlenül, akár remobilizáció útján. A másik magyarázat szerint izotópracionáció játszódhatott le, a redukált szenet tartalmazó fluidum és az oxidáló hatású peridotit kölcsönhatása során – ekkor az olivin karbonátosodás révén ^{13}C veszteség történik és a N/C arány nő. További fracionáció a

gyémánt kristályosodása során történik. Ez utóbbi modell a gyémánttal együtt kristályosodó szilikátok eredetére és az olivin hiányára is magyarázatot ad. A nitrogén aggregáció mértéke átlagosan 78 % volt, ami hosszú, több 100 millió éves nagyságrendű tartózkodási időre utal, 1150-1225 °C –t feltételezve, ami más Dél-Afrikai (Orapa) polikristályos gyémánt képződési hőmérsékletével összhangban van. Az adatok azt mutatják, hogy a polikristályos gyémántok (diamonditok) jóval a felszínre kerülésük előtt kristályosodtak a kratoni szubkontinentális litoszférában.

A hazai ásványi nyersanyagok kutatása terén folytatták a Dunántúli-középhegység jura időszakában felhalmozódott üledékes környezetű Mn-telepek vasas, kovás, oxidos, illetve vasas, oxidos képződményeinek ásványtani, geokémiai és szöveti vizsgálatát. Az úrkúti ércesedést fedő kovás, vasas kifejlődés komplex vizsgálata alapján megállapították, hogy az oxigénszegény, neutrofil környezetben Fe(II) oxidáló baktériumok működésével képződött, tehát őskörnyezeti indikátor.

Kutatásaikkal hozzájárultak a Makói-árok medenceközponti földgáz-előfordulásának vizsgálatához. A legkorszerűbb 3D medence modellezés felhasználásával vizsgálták a gáz forrásközetének érettségét és hőtörténetét. Ezzel hozzájárultak a képződött szénhidrogének mennyiségének becsléséhez, meghatározva a nem konvencionális tároláshoz szükséges pórustérfogatot. A forrásközet paraméterei (összes szerves széntartalom, hidrogén index, vastagság) bizonytalanságának csökkentésére számos szimulációt futtattak.

A metamorf és magmás kőzettani-geokémiai kutatások alap kutatás jellegűek, közvetlen gyakorlati jelentőségük nincs. Egyes képződmények vizsgálata azonban (gyémánt, fluorit) közvetve kapcsolódnak a nyersanyagkutatáshoz. A hazai nyersanyagok genetikájának vizsgálata a készletbecsléshez és a kitermeléshez nyújt fontos alapadatokat. A hazai Mn-telepek kutatásának eredményei felhasználhatók továbbá a környezetszennyezés és elhárítás, valamint a bányarekultivációs tevékenység keretében is.

A földtani környezet geokémiai állapotának és változásainak vizsgálata

A radioaktív hulladékok elhelyezéséhez kapcsolódó alkalmazott kutatásaik keretében vizsgálták, hogyan változik meg a Bataapáti Nemzeti Radioaktív hulladék-tároló befogadó közetének agyagos szigetelő zónáinak anyaga a helyszínen alkalmazott beton alkalikus csurgalékvizének hatására. Az alkalmazott injektáló cement csurgalékvize 12,3 körüli pH-jú, uralkodóan $\text{Ca}(\text{OH})_2$ összetételű oldat. Ez az oldat 112 nap alatt, közönséges hőmérsékleten nem váltotta ki a torlasztó agyagos zónák ásványainak lebomlását és új fázisok sem jöttek létre. A hidrogeokémiai modellezésben tehát új fázisok számottevő képződésével (pl. zeolitok) 25°C-on nem kell számolni. Számolni kell viszont azzal, hogy amorf $\text{Ca}(\text{OH})_2$ válik ki az oldatból, mely vizes, CO_2 tartalmú közegben kalcitá alakul, illetve adszorbeálódik-kicsapódik az agyagásványok felületén és rétegek közötti terében, ezzel csökkentve a montmorillonit duzzadásképeségét. Kimutatták továbbá, hogy a bataapáti vágatok technológia bányavizének opálosságát majd zavarosságát a cementből kioldódó kalcium-hidroxidból a vízben oldott, levegőből származó szén-dioxid hatására nagyon gyorsan, spontán módon kiváló kalcit okozza. A kristályok mérete három mérettartományba esik, de minden esetben 10 μm alatt van. A kalcitkristályok romboéder alakúak és néhány tíz kristályból álló aggregátumokat alkotnak.

Az eredmények nélkülözhetetlenek a hazai kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékok lerakója hosszútávú biztonságának megítélésében.

A talajgeokémiai kutatásaik során nehézfém-terheléses kísérletekben vizsgálták egy agyagbemosódásos barna erdőtalaj kilúgozódási és felhalmozódási szintjei eltérő réz-megkötő képességét. Eredményeik szerint a szennyező anyagok változó mértékben terjedhetnek a talajban az agyagásványos minőség mélység szerinti változása miatt. Vizsgálták továbbá az

akkumulációs szint és annak vermikulit karakterű agyagfrakciójának réz-megkötését a talaj természetes jól/rosszul kristályosodott vas- és mangán-oxid, -(oxi)hidroxid tartalmának jelenlétében és hiányában. Az amorf (oxi)hidroxidok (ferrihidrit), majd az összes, nem szilikátos vas/mangán kioldása az immobilizált nehézfém mennyiségének határozott csökkenését eredményezte. Megállapították, hogy barna erdőtalajban az (oxi)hidroxidokkal társult duzzadó agyagásványok magasabb nehézfém-kapacitással rendelkeznek. Mindemellett kimutatták az ilyen típusú talajkolloidok savanyúságot tompító hatását. A nagy koncentrációban alkalmazott réz csökkentette a talaj vasbevonatos agyagásványainak duzzadókéességét.

Két, eltérő agyagásványos karakterű (egy montmorillonitos és egy vermikulitos) agyagbemosódásos barna erdőtalaj genetikai szintjein és azok agyagfrakcióin vizsgálták a réz és az ólom megkötődését. A szorpciós görbékre illesztett Freundlich izotermák elemzésével kimutatták a szerves anyag elsődleges szerepét mindkét fém megkötődésében a teljes mintákon, továbbá a vermikulit nagyobb fémmegkötő-képességét a montmorillonitéhoz képest. Az eredményeket meggyőzően támasztották alá az agyagfrakciókon elvégzett kísérletek is. Az ólom általában nagyobb mértékű megkötődése a rézhez képest a talaj szerves anyaga felé mutatott nagy affinitásának köszönhető. A vizsgált enyhén savanyú kémhatású talajmintákban viszont az ólom megkötődése sokkal kevésbé jelentős az agyagásványok felületén, mint a rézé. Úgy találták, hogy a teljes talajminták és agyagfrakciók szorpciós képességének kombinált vizsgálatával sokkal hatékonyabban lehet vizsgálni a potenciálisan toxikus fémek megkötődését a talajban.

A talajban található szerves anyag vizsgálata során izolálási eljárást és analitikai módszereket fejlesztettek, illetve teszteltek. A talajok és a recens üledékek szerves anyagának megismerésére alkalmas geokémiai vizsgálati módszert fejlesztettek ki az üledékes közetek szerves anyagának jellemzésére használt módszerek módosításával. A projekt keretében végrehajtott fejlesztések hozzájárultak a Rock-Eval pirolízis felhasználási lehetőségeinek jelentős bővítéséhez: (i) felhasználható a paleokörnyezeti rekonstrukcióban, (ii) a pirogramok matematikai dekonvolúciójával jó közelítéssel becsülhető az OM-t alkotó termikusan labilis és stabil biopolimerek, a humin anyag és a nagy stabilitású OM részaránya, a black carbon (BC) mennyisége, (iii) matematikai módszerrel és kísérletileg is meghatározható a biopolimerek transzformációjának mértéke. Az OM valamennyi – a vízzel oldható (fulvin- és huminsavak), a szerves oldószerben oldódó (lipid) és az oldhatatlan (rezisztens OM (ROM) és BC) – frakciójának kvantitatív elválasztására kialakított lépcsőzetes kémiai izolálást különböző környezetekből származó mintákon tesztelték. A lipid, a BC és az ROM frakciók részletes geokémiai vizsgálatával és a Rock-Eval pirolízissel nyert eredmények együttes értékelésével lehetővé vált az OM felhalmozódásában és transzformációs folyamataiban lényeges szerepet játszó környezeti jellemzők (éghajlat, redox-viszonyok, vízmélység és trofitás), a prekursor biomassza összetétele és a humán tevékenység (pl. égetés) változásainak nyomon követése és hatásának elemzése. A hazai legfőbb talajtípusok szerves anyagának jellemzésére irányuló kutatás keretében kimutatták, hogy az extrakció során alapvető különbséget mutatnak a hidegen nyert alifás szénhidrogének a hagyományosan használt Soxhlet készülékben forró oldószerekkel kinyertektől.

A talaj-nehézfém kapcsolat mélyreható vizsgálatának eredményei megkönnyíthetik a szennyezések pontos elkülönítésének, lehatárolásának és viselkedésének megértését. Az eredmények fontos adatokat szolgáltatnak hulladéktárolók agyag védőrétege fejlődésének, változásának valamint talajok környezetszennyezőkkel szembeni pufferkapacitásának megismeréséhez is.

Paleoklimatológiai kutatásaik keretében folytatták a különböző klímajelző képződmények (cseppkő és kagylóhéj) geokémiai vizsgálatát. Az eredmények komplex értelmezésével sikerült a bronzkori klímaváltozási folyamatok meghatározása. A kb. 3-4 ezer évvel ezelőtti

időszakban egy felmelegedési és egy lehülési esemény játszódott le, ami nem csak lokálisan, hanem a mediterrán, az európai és az észak-atlanti régióban is kimutatható, sőt a hazai geokémiai adatokkal pontosan korrelálható. Az adatok komplex értelmezése alapján az Észak-Atlanti Oszcillációra jellemző hőmérséklet- és csapadékváltozások folyamatai voltak jellemzőek a több ezer évvel ezelőtti időszakban is.

Folytatták a Budai-hegység, valamint a Denizli-medence édesvízi mészköveinek és a kapcsolódó fluidumok geokémiai tulajdonságainak vizsgálatát is. Az elvégzett stabilizotóp-geokémiai és korvizsgálatoknak köszönhetően az édesvízi mészkövek keletkezési idejéről, paleohidrologiájáról, a Duna-teraszokkal való kapcsolatáról eddig alkotott kép jelentősen módosult és az U/Th sorozatos kormeghatározásnak köszönhetően lehetőség nyílt a mészkövek képződése során fennálló éghajlati viszonyok pontosabb rekonstrukciójára is. A jelenleg is képződő pamukkalei előfordulás vizsgálata fontos információkat szolgáltatott a Budai Termálkarszt hidrotermás tevékenységének, paleohidrologiájának a megismeréséhez, valamint az édesvízi mészkőképződést kísérő stabilizotóp-geokémiai folyamatok megértéséhez.

Édesvízi kagylók héjának stabilizotópos összetétele jelentős információt szolgáltat vizes élőhelyek környezet- és klímarekonstrukciójához, viszont ahhoz hogy a kagyló héjában levő izotóp-összetétel változását értelmezni tudjuk, ahhoz szükséges a különböző klíma paraméterek (csapadék, párolgás) hatásának vizsgálata a víz izotóp-összetételére. 10-éves adatsor alapján tesztelték az izotóp tömeg egyensúlyi modell alkalmazhatóságát a Balaton sekély tavi rendszerére. Az alkalmazott modell segítségével a klimatikus paraméterek számszerűsíthetők a prehisztórikus, fosszilis kagylók izotóp szignálja pontosabban értelmezhető.

A Tiszapüspöki Karcusú-ér fúrásszelvényből származó festőkagyló (*Unio pictorum*) kagylóhéjtöredékek stabil izotóp és nyomelem-vizsgálatát is elvégezték, amely a 9000 és 3000 BP közötti időszak paleohidrologiájáról és klímájáról ad információt. Az időszak első felében nyílt folyóvízi állapot figyelhető meg, amelyet a Mn, Fe, Pb, Zn és Cu emelkedett aránya jellemez. A folyóvízi környezet záródik i.e. 7000 körül és tavi környezet alakul ki, melyben a párolgás kiemelt szerepét a Sr koncentráció megemelkedése jelzi. A tavi környezet kialakulását a hőmérséklet növekedése és a tó eutrofizációja kísérte, amit a megemelkedett szerves szén tartalom mutat (negatív $\delta^{13}C$ értékkel).

Igazolták továbbá a völgyi jégárak esetében a jégfelhalmozódási terület részaránya és a jégár területe közt fennálló logaritmikus kapcsolatot. A felismert összefüggésnek éghajlat-rekonstrukciós kutatásokban, nevezetesen az egykori, mára már esetleg teljesen elolvadt, kis területű jégárak egyensúlyi vonalának (tkp. Hóhatár) becslésénél van jelentősége.

A múltbeli klímaváltozások folyamatának megértése, a paleoklimatológia nagymértékben járul hozzá a jövőbeli klímaváltozások előrejelzéséhez, ezért a fenti vizsgálatok nagy gazdasági és társadalmi jelentőségűek.

Vízgeokémiai kutatásaik keretében a Duna és a Szentendrei-szigeten található Tahi I. kútsor egyik csáposkútjának oxigén izotópos összetételének segítségével modellezték az adott csáposkút szivárgási idejét és diszperzióját. Az eredmények azt mutatják, hogy a helyi háttérvíz részaránya elenyészően kicsi, maximum 7 %. A Duna-víz szivárgási ideje a csáposkútig 17-18 nap. A földtani környezet diszperziójának mérőszáma $P_D=0,8$. Egy, az 1900-as évek elején épült beton műtárgy felszínén képződött mesterséges cseppkövek oxigén és szén izotópos összetételét vizsgálva sikerült meghatározni a képződés genetikáját. Igazolták, hogy extrém pH viszonyok között más frakcionációs folyamatok jellemzőek, mint semleges pH közeli cseppkőképződésnél.

Budapest és környéke nagyon gazdag hévizekben, amelyeket számos célra használnak (vízgyógyászat, sport, rekreáció, ásványvíz palackozás). A kezdetben csak a felszínre jutó hévforrások felhasználását gyorsan fölváltotta a hévíz fűtőkutakkal való kitermelése, ami a

nagy produktivitás mellett számos problémát is hozott magával. A pontos áramlási rendszer modellezéséhez elengedhetetlen a víz eredete mellett a vízben oldott komponensek eredetének meghatározása is. Változó mértékben, de mindegyik hévízre jellemző a viszonylag jelentős klorid-tartalom (30-200 mg/l). Nemzetközi együttműködésben ^{36}Cl , trícium és vízkémiai mérésekkel megerősítették a hagyományos vízáramlási modellt, miszerint a föláramló idős karszthévízhez fiatal hideg karsztvíz komponens keveredik. Több esetben sikerült kimutatni a hideg karsztvízben a termonukleáris robbantásokból származó ^{36}Cl -ot, ami egyben jelzi az adott víz 1952 utáni beszivárgását. A ^{36}Cl adatok alapján 10 kút esetében kezdeti becslések készültek a hideg/meleg karsztvíz keveredési arányra.

A termálvizekben oldott szerves anyagok vizsgálata során az oldott szerves anyagok eredetének meghatározására modellkísérleteket végeztek humin anyagokon, ligniten és bitumen (kőzetből nyert szerves anyag) mintákon. Az anyagok nagy hőmérsékleten és nyomáson történő oxidatív, illetve redukzív kezelése azt mutatta, hogy a természetben megfigyelt oldott aromás vegyületek többféle prekursor szerves anyagból származhatnak. A termálvizekben észlelt aromatizáció és demetilizáció a kísérletekben is megfigyelhető. A keletkező vegyületek egy része (pl. a benzol vagy furán is) keletkezik primer (a kísérleti anyagból való leszakadás), és szekunder (a már leszakadt molekulákból) módon is, éppen ezért a polikondenzáció megállapítása nem egyértelmű. Megállapították, hogy a vizsgált anyagok termékei hasonlóak, de arányaikban eltérnek, és megfigyelhető, hogy a hőmérséklet alapvetően befolyásolja a termékek (tehát a vízben oldott szerves mono-, di-, poli- és heteroaromás alkotók mennyiségét és minőségét).

A kulturális örökség tárgyi emlékeinek vizsgálata során folytatták az archeometriai feldolgozásban eddig kevés figyelmet kapott habán ónmázás kerámiák anyagtani szempontú kutatását. A sárospataki vár területén feltárt 17. századi ágyú- és harangöntő műhely habán edénytöredékeinek vizsgálata során kimutatták, hogy a kerámiák fehér opak máza meglepően nagy mennyiségű ónt tartalmaz (>16 t% SnO_2). A vizsgált habán töredékek antmonsárga, rézzöld, kobaltkék és mangánfekete díszítése a reneszánsz itáliai majolikák hatását mutatja. Óntartalom szempontjából azonban a töredékek az itáliai ónmázás kerámiaművesség korai (13-14. századi) darabjaival, az ún. archaikus majolikákkal mutatnak rokonságot.

További magyarországi lelőhelyekről vizsgáltak régészeti grafitos kelta kerámiákat a vaskorból. A kutatás alapja a korábbi eredmények alátámasztása illetve kiegészítése volt. Korábbi átfogó természettudományos vizsgálatok történtek már a Dél-Dunántúl területén található kelta lelőhelyeken feltárt grafitos kerámiák anyagán, ezek geokémiai, C-izotóp geokémiai és ásványtani feldolgozása történt meg. A kapott eredmények jól illeszkednek a korábbi vizsgálatok következtetéseivel. Kimutatták, hogy a grafitos kerámia készítéséhez alkalmazott grafitos soványító anyag metamorf eredetű kőzet, mely import eredetű. A kelták Magyarország északi részét és a Partium magyar határ menti régióját is meghódították. További Északnyugat-Romániából származó kelta kerámiákat is vizsgáltak, annak érdekében, hogy megállapítható legyen a különbség illetve a hasonlóság a korábban vizsgált dél-dunántúli kelta grafitos kerámiaművességgel kapcsolatban. A fenti vizsgálati eredmények arra engednek következtetni, hogy a kelták kiterjedt kereskedelmi szövetséggel rendelkeztek. Hasonló grafitos soványítóanyagot használtak a két letelepedési területen.

A Szépművészeti Múzeum Antik Gyűjteményével együttműködésben kutatták a határon lefoglalt ún. extra Hungariam ókori műtárgyak eredetét, származásuk körülményeit. A vizsgált Venus-szobor esetében a fő feladat az eredetiség kérdésének megválaszolása volt. XRD finomszerkezet vizsgálattal igazolta a stíluskritikai feltételezést, miszerint a tárgy hamisítvány. Az alkalmazott módszer más hamisítványok kiszűrésében is sikerrel alkalmazható.

A Nyíregyházi Jósza András Múzeum munkatársaival együttműködésben kutatták a leletmentő ásatások során feltárt szkíta üvegleletek technológiai jellemzőit, provenienciáját. Ezek a

vizsgálatok unikális eredményeket jelentenek, sem irodalmi, sem pedig vizsgálati előzményei szkíta kori üvegleleteknek nem ismeretesek.

Aszód-Papi földek késő neolit lelőhelyének kagyló- és mészkőékszereinek stabilizotóp összetételének vizsgálatát végezték a származási hely megállapítása céljából. A geokémiai vizsgálatok alapján gyöngyök anyagául szolgáló recens tuskésosztriga (*Spondylus* sp.) héjak származási helyeként kizárható a Fekete-tenger, Égei-tengerről vagy az Adria déli részéről való származás valószínűsíthető. A vizsgált mészkőgyöngyök nem tengeri eredetűek, környékről származó édesvízi mészkövek szolgálták alapanyagként.

A természettudományos vizsgálatok alkalmazása a régészettel bővíti tudásunkat a Kárpát-medencében élt népek szokásairól, kereskedelméről és eszközhasználatáról. Ezáltal pontosabb képet kaphatunk múltunk egy-egy pillanatáról is.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A Geokémiai Kutatóintézet csaknem teljes kutatói kollektívája részt vett a Magyarhoni Földtani Társulat által a Magyar Természettudományi Múzeumban 2010. októberében megrendezett „Földindulás Geokiállítás” rendezvényén. A három napos eseményen több ezer látogató vett részt. Az intézet saját standdal fogadta a látogatókat, ahol az intézet dolgozói ásvány-és kőzetbemutató, geokémiai showmúsort, interaktív fejtörők segítségével ismertették a nagyközönséggel a geokémiai kutatás módszereit és eredményeit.

Az intézet számos kutatója vett részt, illetve tartott előadást tudománynépszerűsítő rendezvényeken (Geonapok – Millenáris park, Föld és Egészség – Magyar Geofizikusok Egyesülete, Sárospataki Református Kollégium). Egy kutató ismeretterjesztő cikket írt egy hazai, a természettudományt népszerűsítő lapban (Földgömb).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatásaikat a korábbi, meglévő hazai és nemzetközi kapcsolatok keretében folytatták.

Az intézet több kutatója vett részt a Nemzetközi Ásványtani Társulat (IMA) négyévente megrendezett konferenciájának szervezésében, ami az ELTE campus területén zajlott le. A konferencia az eddigi IMA rendezvények legnagyobbika volt, több mint 1600 résztvevővel, amelyhez az intézet kutatói nem csak előadásokkal és poszterbemutatókkal, hanem szekciók szervezésével is hozzájárultak. Egy kutató a „Diamond crystallization under natural and experimental conditions” c. szekció szervezésében és lebonyolításában vett részt. Szintén ehhez a konferenciához kapcsolódóan került megrendezésre a Middle-European Clay Conference, amelynek szervezésében az intézet egy másik kutatója vett részt, többek között a „Clays related to environment and health” szekció elnökeként.

Az intézet egy kutatója szekciószervező volt a több mint tízezer résztvevőt felvonultató bécsi EGU kongresszuson.

Az intézet egy másik kutatója a Nemzetközi Vízföldtani Társulat Magyar Nemzeti Tagozata titkáraként megszervezte és levezette annak második félévi 1 napos ankétját. Az intézet szintén részt vett az MTA Környezetgeokémiai Albizottságával közösen a Környezetgeokémiai ankét-sorozat keretében megrendezésre került, „Az ólom környezetgeokémiai szerepe” című egynapos ankét szervezésében.

Az intézet továbbra is jelentős szerepet vállalt a hazai archeometriai kutatóbázis fejlesztésében, archeometriai vezető szerepének megszilárdításában, fiatal kutatógárda kinevelésében. Ennek jegyében részt vett a Szegedi Tudományegyetemen 2010-2011. tanévben bevezetett archeometria régészeti szakirány tantervének, oktatási anyagának

kidolgozásában, két tantárgy oktatását (Bevezetés az archeometriába, Fázis és elemanalitika (MA első év) végzi.

Az intézet 9 kutatója vett részt a felsőoktatásban, összesen 12 kurzus keretében az alábbi egyetemeken: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szegedi Tudományegyetem, Pécsi Tudományegyetem, Magyar Képzőművészeti Egyetem.

Az intézet egyik kutatója 2 éves ösztöndíja 2010. augusztusában járt le a dél-afrikai Johannesburgi Egyetemen, ahol az archaikumi granulit fáciesű Fe-dús és egyéb metamorf képződményeket vizsgálták Szváziföld délnyugati részén. További négy kutató vett részt rövid, 1-2 hetes külföldi tanulmányúton (Tübingeni Egyetem, Helmholtz Zentrum, München, Atomenergia Ügynökség, Bécs).

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A Nemzetközi Atomenergia Ügynökségnél (NAÜ) futó „*Using Environmental Isotopes for Evaluation of Streamwater/Groundwater Interactions in Selected Aquifers in the Danube Basin*” projekt keretében mintegy 23 millió forint értékben kaptak támogatást, ami magában foglalja a Los Gatos Research gyártmányú LGR LWIA-24d típusú lézer analízátort tartalék alkatrészekkel, fogyóanyagokkal, valamint más laboratóriumban elvégzett trícium méréseket. E projekthez kapcsolódóan 2 millió forint önrész támogatást kaptak a Magyar Tudományos Akadémiától a lézer analitikai laboratórium kiépítésére, kiegészítő berendezések beszerzésére, valamint a Szentendrei-szigeten vízmintavételezésre. A NAÜ projektben 6 ország vesz részt (Szlovákia, Magyarország, Szlovénia, Horvátország, Szerbia és Bulgária). Célja a parti szűrős víz bázisok vízáramlási modelljeinek pontosítása környezeti izotópos adatokkal 7 mintaterületen.

A Magyar Nemzeti Múzeummal és az Iparművészeti Múzeummal közösen konzorciális kutatási OTKA pályázatot nyertek el „*A magyarországi köz- és magángyűjteményekben fellelhető habán kerámiák művészettörténeti és archeometriai kutatása, számítógépes adatbázis és szakkatalógus készítése*” címmel. Az intézet a pályázatban a habán kerámiák anyagtan alapú archeometriai feldolgozását végzi. A pályázat több szakterület (művészettörténet, régészet, restaurálás és természettudományok) összefogásával a közép-európai habán kerámiaművesség magyarországi emlékanyagának átfogó feldolgozását célozta meg. Az elnyert támogatás az intézet részére 4 évre összesen 4,488 MFt.

Szintén OTKA-pályázat keretében nyertek támogatást a „*Nyílt láncú reguláris izoprenoid alkánok képződése, stabilitása és alkalmazása fácies- és érettségjelzőként*” című projektre. A támogatás 4 évre összesen 23,840 MFt. A projekt során a szerves geokémiában fontos molekuláris mutató, a prisztán/fitán hányados (Pr/Ph) alkalmazhatóságát kívánják vizsgálni kőolajokban és bitumenekben. Céljuk a hányados érettség függőségének jobb megértése és alkalmazási lehetőségeinek biztosabbá tétele, fenntartások megfogalmazásával. A kutatásba a szakma vezető kutatóhelyeit is bevonják.

Intézeti témavezetéssel indult a „*Lézerspektroszkópia alkalmazása geológiai minták hidrogénizotóp-összetételének meghatározásában*” című OTKA kutatás, amely egy teljesen újszerű módszer kidolgozását célozza. A stabilizotóp-elemzési lézerspektroszkópia az utóbbi évek technikai áttörése, az alkalmazások kidolgozása világszerte most kezdődik. A kutatócsoport a geológiai minták elemzésének módszertani kidolgozását vállalta. Jóllehet az intézet részéről a szerződés aláírása megtörtént, a finanszírozás még nem indult meg. Az elnyert támogatás négy évre 42,893 MFt.

A dolomitképződés mechanizmusának feltárását célzó OTKA kutatást is megindult az intézet egy kutatójának részvételével „*Dunántúli-középhegységi felső perm és triász dolomitok összehasonlító vizsgálata és genetikai értelmezése*” címmel. A kutatás során a több km vastagságot elérő középhegységi összletben található több genetikai típusú dolomit vizsgálata fog megtörténni. A kutatás négy éves kerete 13,624 Mft.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Demény A, Kele S: Siklós Empirical equations for the temperature dependence of calcite-water oxygen isotope fractionation from 10 to 70 °C. Rapid Communication in Mass Spectrometry, 24: 3521-3526 (2010)
2. Horváth P, Balen D, Finger F, Tomljenovic B, Krenn E: Contrasting P-T-t paths from the basement of the Tisia Unit (Slavonian Mts., NE Croatia): Application of quantitative phase diagrams and monazite age dating. Lithos, 117: 269-282 (2010)
3. Kern Z, László P: Size specific steady-state accumulation-area ratio: an improvement for equilibrium-line estimation of small palaeoglaciers. Quaternary Science Reviews, 29: 2782-2788 (2010)
4. Polgári M, Hein JR, Tóth M, Brukner-Wein A, Vigh T, Bíró L, Cserhádi C: Genesis of a regionally widespread celadonitic chert_ironstone bed overlying Upper Lias manganese deposits, Hungary. Journal of the Geological Society, 167: 313-328 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Geokémiai Kutatóintézet

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	29	Ebből kutató ² :	16
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	2
		Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			6
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			38
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			36
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 9	idegen nyelven:	3
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	16
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	13
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 1	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	26,15	Összes független hivatkozás száma:	339
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	491		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora: 1
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			23
	posztterek száma:		27
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			9
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	7	PhD:	6
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		113,11	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	3	Teljes saját bevétel:	31,58 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			6
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		6,52	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	7,42 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0,59	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3,53 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		18,16	MFt

IZOTÓPKUTATÓ INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33., 1525 Budapest, Pf. 77.

telefon: 1-392 2531; fax: 1-392 2533

e-mail: wojn@iki.kfki.hu; honlap: www.iki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézeti szakmai tevékenység négy fő irányában előzetesen a következő feladatok szerepeltek.

A nukleáris analitikai módszerek továbbfejlesztése és alkalmazása terén:

- A Prompt Gamma Aktivációs Analízis (PGAA), ill. az (n, γ) módszer továbbfejlesztése a hidegneutronos PGAA adatkönyvtár bővítésével, a gamma erősségfüggvény meghatározásával különböző anyagokban és a neutronbefogási hatáskeresztmetszetek meghatározási módszereinek fejlesztésével.
- A PGAA módszer alkalmazása régészeti és geológiai eredetű minták, ill. IV. generációs atomreaktorok és transzmutációs berendezések szerkezeti- és üzemanyagának vizsgálatára.
- Az alacsony hőmérsékletű in-beam Mössbauer mérőrendszer kialakításának megkezdése.

A nukleáris anyagok vizsgálata terén:

- Nukleáris biztosítéki célú vizsgálati módszerek fejlesztése dörzsminták elemzéséhez, egyedi részecskék lokalizációjának összekötése az izotóppösszetétel meghatározással, neutron-koincidencia mérésiértékelő szoftverek fejlesztése.
- Magyarországon található uránérccek nyomelem-összetételének vizsgálata eredet meghatározáshoz.
- Hideg neutronos kísérletek szaggatott üzemben urán kimutatására koincidencia berendezéssel.
- Hosszú felezési idejű radioizotópok migrációját befolyásoló redox folyamatok vizsgálata a nukleáris hulladékok perspektivikus hazai tárolóközeiben.

A sugárhatáskémia - dozimetria terén:

- Cellulóz ojtása akrilát típusú monomerekkel, az ojtott felületek kémiai módosítása új funkciós csoportok kialakítása céljából.
- Hidrogének szintézise és felhasználása etilén szabályozott adagolására.
- Aromás vegyületek és gyógyszer molekulák, ill. metabolitjaik sugárzásos lebomlásának vizsgálata híg vizes oldatokban.
- Ritkaföldfémekkel aktivált magnézium-borát minták optikai és dozimetriai tulajdonságainak vizsgálata a szerkezet és az aktivátor koncentráció függvényében.
- Elektronikai alkatrészek vizsgálata retrospektív (utólagos, baleseti, törvényszéki) dozimetriai felhasználhatóságuk szempontjából.

A katalízis – környezeti katalízis terén:

- Az arany tartalmú katalizátorok vizsgálata témakörében különböző TiO_2 (anatáz, brookit), ill. mangán-oxid hordozók hatásainak összehasonlítása, valamint ezüsttel készített ötvözet modelrendszer tanulmányozása.
- A metán száraz reformálásának témakörében szol/gél módszerrel előállított új típusú kompozit katalizátorok tesztelése.
- A környezeti katalitikus folyamatokkal kapcsolatban dinitrogén-oxid bontás és metán eliminálás optimalizálása módosított ZSM-5 zeolit katalizátorokon, hidrodesszulfurálás részfolyamatainak vizsgálata ^{35}S jelzett tiofénnel Ni, MoO_x és NiMoO_x katalizátorokon és

nagy szervesanyag tartalmú szennyvizek oxidatív katalitikus kezelése, gyógyszergyári technológiai vizek tisztítása és hasznosítása.

Az intézet munkájának számottevő része a közvetlen kutatási tevékenység végzése mellett *szakmai-tudományos háttértevékenység* ellátására is irányul hatóságok számára, a nukleáris biztosítéki tevékenység, a sugárbiztonság, a radioaktív anyagok szállítása, nyilvántartása, és az ismeretlen eredetű nukleáris anyagok azonosítása területén.

Az intézet feladatai közé tartozik továbbá a Budapesti Neutron Centrumban egy unikális mérőberendezés üzemeltetése is – itt a szakmai-technikai infrastrukturális háttérrel kell biztosítani az EU különböző országaiból érkező kutatók számára.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A nukleáris analitikai módszerek továbbfejlesztése és alkalmazása

Továbbfejlesztették és működtették az unikális mérési lehetőségeket nyújtó hidegneutronos prompt gamma aktivációs analízis (PGAA) és a neutron indukált prompt gamma spektroszkópia (NIPS) mérőberendezéseket. Az eszközök több EU-s keretprogramból is hozzáférhető kutatási infrastruktúrák, alkalmas témával pályázó, külső (EU-s) kutatók számára is. A módszer továbbfejlesztés során további 23 elemet standardizáltak a meglévő PGAA referencia adattár bővítéséhez. Nyalábszaggató PGAA módszerrel meghatározták 12 rövid- és közepes felezési idejű radionuklid bomlási k_0 értékeit. A kapott adatokat egy nemzetközi bizottság (ICAA) veti össze a neutronaktivációs analízisben használatosakkal.

A PGAA módszer alkalmazásával

- *magfizikai* vizsgálatokban neutronbefogási hatáskeresztmetszeteket (^{235}U , ^{54}Fe), hasadási neutronok szögeloszlását (^{235}U) és dúsított mintákon befogási gamma-sugárzás spektrumokat (^{114}Cd és $^{177-180}\text{Hf}$) határoztak meg.
- Publikálták a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (NAÜ) által koordinált, mintegy 15 éven át tartó „Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations” c. projekt összefoglalóját, amely a nukleáris reakciószámítások alapadatait és eljárásait gyűjtötte össze.
- A Magyar Nemzeti Múzeummal, valamint külföldi felhasználókkal együttműködésben roncsolásmentes *archeometriai* mérésekkel (PGAA) meghatározták különböző anyagú pattintott és csiszolt kőeszközök, kerámiák és potenciális nyersanyagaik elemösszetételét, amiből a leletek nyersanyagának eredetét lehetett meghatározni (proveniencia vizsgálat). Sikeresen elkülönítették a Horvátország, ill. Bosznia területén talált obszidián leletek kétféle nyersanyagforrását (Kárpáti, ill. mediterrán). Üvegminták összetétele alapján középkori, barokk üvegyártó műhelyeket azonosítottak. Folytatták a Szeged melletti Gorzsa lelőhely csiszolt kőeszköz anyagának vizsgálatát eredetmeghatározás céljából. Egy esettanulmány során a Polgár-Csőszhalom lelőhelyről származó neolitikus rézgyöngyök kémiai összetételét és kristályszerkezetét vizsgálták PGAA-val, neutron-diffrakcióval és röntgen-diffrakcióval, restaurálást megelőző állapotfelmérés céljából.
- Három földrésről származó *geológiai mintákban* és kondritos meteoritokban ásványok (pl. serpentin, gyémánt) és kőzetek (bazalt, andezit, granodiorit) fő- és nyomelem komponenseit vizsgálták. A vizsgálatok segítségével az adott minta eredetére, a

környezetében lejátszódott geológiai folyamatokra vonatkozó alapvető információkat nyertek.

- A Kárpátok vonulatát követő intruzív magmás testek közettani, geokémiai és geokronológiai tanulmányozása keretében vizsgálták az intruzív testek szerepét a neogén-kvarter mészkalkáli vulkanizmus fejlődésében. A Pieniny-, Moráviai- és Torjagai-területéről származó kőzetminták nyomelemzési adatai szerint az intrúziók szubdukciós nyomokat mutatnak. A Pieniny andezit börtartalmának mérésével arra következtettek, hogy a második intruzív szakaszban benyomuló magma az első szakaszban keletkezett kőzeteket hidrotermálisan módosította, növelve azok fluid mobilis elemtartalmát, különösen a B és Pb koncentrációkat. A Moráviai andezit intrúziók magasabb B-tartalma pozitív korrelációt mutat a K_2O -tartalommal, ami a kéreg beolvasztásából eredő fluid-tartalom növekedésre utal. A Torjagai minták a Moráviaiakhoz hasonlóan kéreg eredetű fluid hatást jeleznek. A Torjagai terület intrúzióinak kora megelőzi a tőle délre elhelyezkedő vulkáni képződmények képződési korát.
- *Szerkezeti és egyéb anyagokat* vizsgáltak. Katalizátorok elemi összetételét, nyomelem tartalmát határozták meg. Az *in-situ* PGAA módszer különösen alkalmasnak bizonyult a minta felszínén, a gáztérben, illetve a tömbfázisában lévő hidrogén kimutatására, a reakció mechanizmus feltárására.
- Az EU JRC ISPRA ISPC-vel együttműködésben kis mennyiségű hasadóanyag különböző mátrixokban történő kimutatására alkalmas neutronkoincidenca berendezést alakítottak ki, amelyet a NIPS mérőhely neutronnyalábjára telepítettek. A kísérletekben a rutin módszerhez képest – amely Am-Li neutronforrást használ – mintegy 6-7 nagyságrenddel jobb kimutatási határt értek el ($1 \mu\text{g } ^{235}\text{U}$). Konstans és pulzáló nyalábot használva, ill. por és folyadék kalibrációs mintasorozattal határozták meg a berendezés teljesítőképességét. Megmutatták, hogy a jel nagysága nem függ jelentősen a mátrixtól, illetve a minta méretétől.
- Folytatták az alacsony hőmérsékletű in-beam Mössbauer mérőrendszer kiépítését, 77 K-es méréseket végeztek nagydiszperzitású fémes arany mintákon.

Nukleáris anyagok vizsgálata

- A digitális *neutron-koincideniás* méréseknél elkészült egy 16 és egy 32 csatornás berendezés, melyek új diagnosztikai és kutatási lehetőségeket biztosítanak. A csatornaszámoknak a beérkezési idővel történő együttes rögzítését úgy oldották meg, hogy a feldolgozható impulzusgyakoriság alig csökkent. Az adatfeldolgozással meghatározható az egyes csatornák járuléka a detektor hatásfokához, valamint kiszámítható a gyűrű-hányados, ami fontos jellemzője a detektoroknak. Az elkészült 32 csatornás berendezést a Los Alamos-i kutatóközpontban az ottani laboratórium még kísérleti stádiumban levő berendezésével, illetve a Canberra egycsatornás készülékével hasonlították össze jó eredménnyel.
- A *dörzsminták* gyors és hatékony elemzéséhez korábban kidolgozott mintaelőkészítési és induktív csatolású plazma tömegspektrometriás analitikai módszert továbbfejlesztették az urán és plutónium mellett egyéb aktinidák, pl. neptúnium és amerícium meghatározásához. A módszert felhasználva az ICP-MS laboratórium jelenleg a NAÜ Nemzetközi Laborhálózatához (NWAL) történő hivatalos csatlakozási eljárásában vesz részt.
- Egyedi *urán-tartalmú részecskék* lokalizációjához matematikai algoritmusokat dolgoztak ki, melyekkel a részecskék helye egy mintatartón pontosan meghatározható elektronmikroszkóp alatt, majd a mintatartót megfelelő analitikai berendezésbe helyezve a

részecskék ismételten azonosíthatók. Emellett az izotóp-összetétel meghatározásához olyan lézereblációs ICP-MS analitikai eljárást fejlesztettek, amellyel már néhány mikrométer nagyságú részecske dúsítása is pontosan meghatározható. Ez a módszer lehetőséget ad arra, hogy a lefoglalt urán-tartalmú anyagok mindössze néhány apró szemcséből karakterizálhatók legyenek.

- *Lefoglalt nukleáris minták* eredetének meghatározásához U-tartalmú modelloldatokból, illetve uránércekből és egyéb urán-tartalmú anyagokból nyomelemek meghatározására alkalmas eljárást fejlesztettek ki. A módszer alkalmas arra, hogy a ritkaföldfém profilok felvétele mellett valós minták (pl. ismeretlen eredetű, lefoglalt urán-oxidok) eredet-meghatározásához alkalmazható legyen. A módszert valós mintákon, uránércek elemzésén tesztelték.
- *Nagyaktivitású nukleáris hulladékok* (kiégett atomerőművi fűtőelemek) közzettestekben történő elhelyezésével kapcsolatban azt vizsgálták, hogy az izotópmigráció folyamatát mennyire befolyásolják az alkotó ásványok és a migráló radioizotópok között lejátszódó redox folyamatok. Egy perspektivikus hazai tárolóközetben, a Bodai Aleurolit mintáiban elsősorban a szorpció/deszorpció az izotópterjedés sebességét meghatározó befolyásoló tényező, de $\text{Fe}^{2+} \leftrightarrow \text{Fe}^{3+}$ redox átalakulás is megfigyelhető az ásványokban speciális körülmények között.

Sugárhatáskémia – dozimetria

- Vízben oldott szerves szennyeződések eltávolítására *szelektív adszorbenseket* állítottak elő glicidil metakrilát ojtásával pamut-cellulózra. A sugárzással egyidőben ojtott mintáknál az ojtási hatékonyság, és az adszorpciós kapacitása is nagyobb volt, mint az előzetes besugárzás után ojtott mintáké. További adszorpciós képesség javulást értek el azzal, hogy az ojtott mintákat β -ciklodextrinnel módosították.
- Módszert dolgoztak ki az etilén gáz diffúzió sebességének meghatározására különböző gázáteresztő képességű polimer fóliákon keresztül. Az eredményeket *szabályozott etilén adagolást* megvalósító gyümölcsérlelő eszköz kialakításához használják fel, amelyet az együttműködő partnerek állítanak elő.
- Egy gyulladáscsökkentő-fájdalomcsillapító gyógyszermolekula (diclofenac) *sugárzásos lebomlását* vizsgálva híg vizes oldatokban, megállapították, hogy mind a hidratált elektron, mind a hidroxilgyök hatékonyan lebontja a vegyületet. A KOI (kémiai oxigénigény) értéke egy nagyságrenddel, a TOC (teljes szerves széntartalom) érték pedig a felére csökkent 20 kGy elnyelt dózis hatására. Impulzusradiolízis vizsgálatok eredményei alapján arra következtettek, hogy a bomlás közterméke ciklohexadienil típusú gyök.
- Fenol modellanyagot alkalmazva megállapították, hogy nagymértékben nő a *toxikus gyógyszergyári szennyvizek* sugárzásos lebontásának hatékonysága a vízben oldott oxigén koncentrációjának növelésével.
- Elkészítették és beüzemelték a víz-, illetve szennyvíz-tisztításra alkalmazható 20 – 50 l kapacitású *demonstrációs berendezést*. A vízanalitikai laboratórium berendezését NAÜ támogatással HPLC-MS-MS készüléssel egészítették ki. A készüléket beüzemelték és kiegészítő méréseket, termék azonosítást is végeztek.
- Az elektronikai eszközök alkatrészeinek vizsgálatára alapozott, *retrospektív dozimetriai* módszereket alkalmazó dózisbecslési eljárás kidolgozása során a téma szakirodalmának tanulmányozása alapján megállapították, hogy a minden eszközben előforduló felületszerelt ellenállások alkalmasak lehetnek a cél megvalósítására. Az ellenállások

kerámia hordozóin végzett termolumineszcencia (TL) mérések sorozatával megállapították, hogy a hordozó anyag (aluminium-oxid kerámia) egyes TL tulajdonságai (érzékenység, emissziós hullámhossz, reprodukálhatóság) kedvezőek a kitűzött cél szempontjából. Fadingjük azonban anomális, ezért a dózisbecslés pontosságának növeléséhez ezen tulajdonság további vizsgálata, illetve azokra alapítva korrekciós eljárás kidolgozása szükséges.

- Az *optikailag stimulált lumineszcencia* (OSL) mérésére alkalmas saját fejlesztésű berendezésüket tesztelték, alkalmassá tették rendszeres mérésekre.
- Elvégezték különböző előállítóktól (Szerbia, Ukrajna) származó, többféle szennyezővel *aktivált* lítium-tetraborát *doziméter anyagok* alapvető TL tulajdonságainak összehasonlító vizsgálatát. Megvizsgálták új fejlesztésű magnézium-borát alapú potenciális doziméter-anyagok alapvető lumineszcencia tulajdonságait.

Katalízis – környezeti katalízis

Aranytartalmú katalizátorok tanulmányozása során

- $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ felületen kialakított FeO_x/Au inverz modellrendszereken folytatták a CO oxidációja aktivitás-szerkezet összefüggéseinek vizsgálatát. Molekula sugár epitaxiával (MBE) választottak le arany, ill. különböző összetételű kétfémes AuFe és arra különböző vastagságú Fe rétegeket az MTA SZFKI-val együttműködésben. Az arany (111) orientációjú és fémes vas jelenlétét, valamint a FeO_x amorf jellegét mutatták az XRD mérések. A katalitikus $\text{FeO}_x/\text{Au}/\text{SiO}_2/\text{Si}(100) > \text{FeO}_x/\text{SiO}_2/\text{Si}(100) > \text{Au}/\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ aktivitássorrend megegyezett a korábban, más módszerekkel kialakított katalizátorokon tapasztalttal. A $\text{FeO}_x/\text{Fe}_{50}\text{Au}_{50}/\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ aktivitása is nagyobb, mint a $\text{Fe}_{50}\text{Au}_{50}/\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ mintáé. Kalcinálás hatására a katalitikus aktivitás drasztikusan lecsökken, ami egy újabb redukálással ismét megnövelhető.
- Megkezdték az oxalátos lecsapással előállított és Au nanorészecskékkel módosított Au/MnO_x katalizátorok vizsgálatát CO oxidációban, PROX és $\text{NO}+\text{CO}$ reakciókban. A hosszú ideig tárolt Mn-oxalátból kalcinálással előállított MnO_x nem mutatta a friss oxalát elbontásával nyert nagy fajlagos felületű tús szerkezetet, és CO oxidációban is kisebb aktivitású volt. Arannyal módosítva (karbamidos lecsapás-precipitáció (DP) ill. szol adszorpció módszerrel) a CO oxidációs aktivitás növekedett, PROX folyamatban nagyobb, bár így is csak 60% CO konverzió volt elérhető. A minták redukzív előkezelése gyengébb katalitikus jellemzőket eredményezett, mint az oxidatív előkezelés.
- Glükóz szelektív oxidációjában vizsgáltak két különböző méretű Au szol adszorpciójával előállított SiO_2 , TiO_2 és CeO_2 hordozós Au katalizátorokat. Ellentétes hordozó- és mérethatást tapasztaltak, mint a CO oxidációs aktivitásban. Az utóbbi folyamatban aktív TiO_2 és CeO_2 hordozók csökkentik a glükóz oxidációs aktivitást.
- Kétfémes AuAg katalizátorok vizsgálata kezdődött meg CO, NO eltávolítás, és szelektív oxidációs folyamatokban történő alkalmazásra. Különböző összetételű, 4-6 nm átmérőjű, látható-UV spektroszkópiai vizsgálat szerint kétfémes nanorészecskéket állítottak elő hidroszolokban, ezeket adszorbeálták különböző hordozókra. Szelektív glükóz oxidációban a kétfémes $\text{Au}_{80}\text{Ag}_{20}/\text{SiO}_2$ minta szinergikus aktivitásnövekedést mutat.
- Au/TiO_2 hordozós katalizátorokban vizsgálták a TiO_2 kristály módosulatának hatását a CO oxidációs aktivitásra. Kétféle módon vittek fel Au nanorészecskéket tiszta brookit, keverék anatáz-brookit (55:45) és anatáz-rutil (85:15) hordozókra; 5-6, ill. 3-5 nm átlagos átmérőjű Au nanorészecskéket adszorbeáltattak hidroszorból ill. alakítottak ki karbamidos

DP technikával. Szerkezetvizsgálatok (TEM, XRD, XPS) és katalitikus vizsgálatok alapján - figyelembe véve az Au és TiO₂ részecskeméreteket - az Au-anatáz határfelület Au-brookitét meghaladó CO oxidációs fajlagos aktivitására következtettek.

Metán száraz reformálásának tanulmányozása során

- A Ce-Zr oxid hordozós Ni katalizátoron az MgAl₂O₄ hordozóhoz képest csak kismértékű szénlerakódást tapasztaltak a katalizátorok felületén, mely a hordozóban lévő mobilis oxigénnek tulajdonítható. A széles Ni méreteloszlás és a nagyobb, szinterelődött fémrészecskék jelenléte növelte a katalizátor hosszútávú stabilitását. Megállapították, hogy a hordozó nagy Ce/Zr aránya esetén a fluorit rácsban kötött Ni szinterelődése nem jelentős, de redukálhatósága csökkent, így kisebb aktivitás érhető el. A reformálási reakcióban feltételezett részlépés, a fordított Boudouard reakció lehetőségét vizsgálták kiválasztott mintákon metánbontásából származó szénlerakódás CO₂-dal való eltávolítása során. Az összes lerakódott szén CO-dá oxidálódott a CO₂ áramban.
- Az Au-Ni rendszer reformálási reakcióban való alkalmazhatóságát vizsgálták SBA-15 szilika, MgAl₂O₄ vagy MgAl₂O₄/SBA-15 hordozós mintákon. Az Au impregnálással való felvitele a kész Ni/MgAl₂O₄-ra kis Au tartalom (kb. 0,5%) esetén nem okozott jelentős változást, míg 3% Au esetében aktivitásnövekedést tapasztaltak, mely arra utal, hogy valóban Au-Ni határfelület keletkezett. Ni/SBA-15-re DP technikával felvitt Au csökkentette az aktivitást, és nem adott teljes CO₂ konverziót még magas hőmérsékleten sem. Az Au bevitelének harmadik módja az Au(III) folyadékfázisú redukciója volt a Ni szolban közvetlenül annak keletkezése után, majd adszorpciója a hordozón, mely technika újszerűnek mondható, optimalizálása folyamatban van. A Ni-szolt az Au-szoloknál alkalmazott tannin-citrát elegyben borohidrides redukcióval állították elő, 10 nm-es monodiszperz Ni részecskéket eredményezve. E szolos módszer segítségével feltehetőleg az Au-Ni felületek szoros érintkezése (a Ni felületi dekorálása Au-val) miatt az impregnálással készült AuNi/MgAl₂O₄ mintához képest a katalitikus aktivitás megnő és a szénképződés drasztikusan lecsökken.

Környezetvédelmi katalitikus folyamatokban

- A szennyvíz oxidációs vizsgálatok keretében a reakció paraméter hatást vizsgálták kísérlettervezési program alapján. Megállapították, hogy a hőmérséklet a reakció sebességét leginkább meghatározó paraméter. Vizsgálták fenolát modelloldaton és egy valós gyógyszergyári szennyvízen a nagy energiájú sugárzással iniciált nedves oxidációt. Megállapították, hogy a reakció már szobahőmérsékleten végbemegy, ami a szokásos 150 illetve 230°C feletti hőmérséklethez képest nagyon jelentős csökkenés.
- Hidrodeszulfurálási folyamatokban meghatározták két alumínium-oxid hordozós, nikkellel promoveált, ill. nikkelt nem tartalmazó molibdén oxid (NiMo és Mo) katalizátor kénfelvételi és kén izotópcserre képességének mértékét tiofén útján végzett kénezés során 35-S-el jelzett tiofén segítségével, és összehasonlították a közel azonos (~18 torr) parciális H₂S nyomásnál mért kénfelvétel értékekkel. Megállapították, hogy tiofénből a kénfelvétel kisebb mértékű, mint a kénhidrogén esetében, és a tiofénből felvett kén kisebb arányban cserélődik, mint a H₂S cirkuláció során felvett kén. Első megközelítésben nem tapasztaltak különbséget a tiofénrel ill. H₂S-dal szulfidált katalizátorok HDS aktivitásában. 6 különböző összetételű ipari célra használt, ill. használni tervezett katalizátor-mintát vizsgáltak a Pannon Egyetemmel folytatott együttműködés, a MOL támogatásával elnyert TÁMOP (Társadalmi Mobilitás és Környezet) B4 alprogram keretében. A szulfidált minták aktivitása mind a tiofén, mind az izobutilén konverzióban felülmúlta, míg a benzol és a hexán konverzióban nem érte el a szulfidálatlan mintákét.

- Metán és N₂O reakciója tanulmányozása során folyadékfázisú ioncserével H-ZSM-5 zeolitba galliumot beépítve erősen savas alapkatalizátort állítottak elő. A H-ZSM-5, valamint Ga/H-ZSM-5 zeolitokat átmeneti fémek (Fe, Co, Ni, Mo, Ru, Pd, Ag, Ir, Pt, Au) sóival impregnálva egy- és kétfémes katalizátorokat szintetizáltak. TPR, CO adszorpció és NH₃ lépcsőzetes termo-deszorpció (STD-NH₃) módszerekkel megállapították, hogy mindegyik minta savas és redox kettős funkcióval rendelkezik a N₂O bontás és N₂O+CH₄ reakciókban. Az Ir vagy Ru nemesfém tartalmú zeolit minták TPR spektrumaiban, az általános több csúccsal rendelkező többi mintával ellentétben, csak egy csúcs figyelhető meg, vagyis ezek a minták egytípusú kétfunkciós savas-redox aktív centrumokkal rendelkeznek, ezeken megy végbe valószínűleg mindkét folyamat, a N₂O bontása, valamint az N₂O redukciója metánnal is.

Összefoglalva

- A felsorolt eredmények hasznosítása, az *intézeti tevékenység és a gazdasági szféra együttműködése* leginkább az újonnan kidolgozott, ill. a régebben is alkalmazott egyedi mérési módszerek, elsősorban analitikai alkalmazásában ölt testet. Ez a hasznosítás tág értelemben veendő: egyes magfizikai állandók meghatározásától és a megfelelő tudományos adatbázisokban történő rögzítésétől a paksi atomerőművi üzemzavart követően újratokozott üzemanyag-hulladék nukleárisanyag tartalmának megmérésén keresztül a különböző minták egyszerűbb elemanalíziséig, izotópösszetételének meghatározásáig terjedhet.
- A *kutatások relevanciáját* valószínűleg jól jellemzi az intézet pályázási eredményessége is (u.i. jó eséllyel a releváns pályázatok számíthatnak támogatásra). Mind hazai, mind külföldi vonatkozásban az intézet pályázati eredményessége jónak ítéltető.
- Az intézet kutatásai a nemzeti és egyetemes *kulturális örökség méltó megőrzéséhez* elsősorban a PGAA mérőberendezéssel végzett, esetenként kiállítási tárgyakra is kiterjedő archeometriai vizsgálatokkal járulnak hozzá. A proveniencia vizsgálatok alapvetően új, pl. a korabeli kereskedelmi viszonyokra vonatkozó információkkal bővítik a hazai és nemzetközi régészeti ismereteket. A roncsolásmentes állapotfelmérés a kulturális örökség megőrzésében (restaurálás, konzerválás) is fontos szerepet játszik.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézeti tevékenység és a társadalmat foglalkoztató kérdések kapcsolatának megítélésénél jelentős szempont a kutatások tematikája. Ebben nagy súllyal szerepelnek olyan intézeti vizsgálatok, melyek a társadalom számára is fontos kérdések megoldásához járulhatnak hozzá. Ilyen vonatkozásban megemlítenő, hogy az intézet a hazai nukleáris biztosítéki tevékenység bázisintézete, egyike az Országos Atomenergia Hivatal Technikai Támogató Intézményeinek. Számos speciális szakértői tanulmány elkészítése és fejlesztési feladat megoldása mellett működteti, és karban tartja az országos izotópnnyilvántartás adatbázisát is. Elmondható, hogy az intézet által kidolgozott és alkalmazott módszerek hozzájárulnak a hazai nukleáris biztosítéki rendszer és a nukleáris törvényszéki analitika hatékonyságának folyamatos fejlesztéséhez.

Emellett az intézeti kutatási tematikában jelentős súllyal szerepelnek környezetvédelmi katalitikus, ill. a környezetet károsító anyagok lebontásával, eltávolításával kapcsolatos kutatások is. Ezek utóbbiak egyike pl. a víztisztítással kapcsolatos - a toxikus szennyeződések sugárzásos, ill. katalitikus, valamint ezek kombinációjával történő eltávolítási módszereinek kidolgozására irányul. Az intézeti eredmények jövőbeli alkalmazások alapjául szolgálhatnak.

Az intézetben folyó kutatásokat a külső érdeklődők az intézeti honlapról (www.iki.kfki.hu) is megismerhetik, ahol a kutatások ismertetése, a különböző előadói részek, szemináriumok

programjai és jórészt az előadások diái is hozzáférhetőek a „hírek”, a „szemináriumok”, valamint a „magunkról” c. rovatokban. A Magyar Tudomány Ünnepe keretében az intézet 2010. november 12-én nyílt napot szervezett, melyen az intézet munkáját bemutató előadások hangzottak el, és az érdeklődők az intézet speciális laboratóriumait is meglátogathatták. Ugyanennek az eseménysorozatnak keretében rendezett „Anyagtudományi kutatások a Budapesti Kutatóreaktor Műszerközpontban” c. előadássorozat két előadásán ismertették intézeti kutatók újabb vizsgálataik eredményeit az MTA székházában november 16-án.

Intézeti kutatók szerepeltek a médiában is: egyik kutatójuk az m2 TV Záróra c. műsorában ismertette régészeti kutatásait.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A beszámolási évben kötött megállapodások

Kétoldalú együttműködések:

- MTA-CNR, Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturali, CNR (Palermo) – Kétfémes katalizátorok fejlesztése a metán száraz reformálására témában.
- Osztrák-Magyar Akció Alapítvány OMAA 77öu14, „Feld- und Grenzflächeneffekte in der CO Oxidation auf Edelmetallen” témában.

Nemzetközi rendezvények

- December 6 – 10 között rendezte az intézet a NAÜ keretében 15 ország részvételével zajló CRP projekt éves értekezletét (Third Research Coordination Meeting of the Coordinate Research Project on “*Development of Novel Adsorbents and Membranes by Radiation-Induced Grafting for Selective Separation Purposes*”),
- az intézet kutatói a Nemzetközi Ásványtani Egyesületek budapesti konferenciájához kapcsolódó egynapos szatellit-kurzust tartottak aug. 28-án: „*Neutron diffraction and neutron spectroscopies*” (IMA2010 side meeting) címmel,
- a nemzetközi ERA Chemistry projekt koordinációs ülését tartották december 12 - 13-án az intézetben.

Kutatói mobilitás

Az intézettel kapcsolatos kutatói mobilitás egyik fő területe vendégkutatók fogadása. A BNC kutatócentrum keretében három különböző projekt (FP6 EFNUDAT, FP7 CHARISMA, FP7 NMI3) honlapjai folyamatosan fogadták, ill. fogadják az alkalmas pályázatokat a PGAA-NIPS berendezés használatára, ill. a részt vevő munkatársak az EU-s kutatókat. 2010-ben az EU-s CHARISMA projekt keretében 5, a NMI3 keretében 4 alkalommal 5, az EFNUDAT keretében 4 alkalommal 9 kutatót fogadtak.

NAÜ felsőfokú képzések keretében is 4 kutatót fogadtak hosszabb időre. A Koreai Demokratikus Köztársaságból 2 vendégkutató 1-1 hetet töltött az intézetben NAÜ ösztöndíjjal. Az MTA-CNR együttműködés keretében két palermói kutatót fogadtak. Szlovén kétoldalú együttműködés keretében egy vendégkutató végzett munkát az intézetben és a Kémiai Kutatóközpontban két héten keresztül. Különböző ukrán együttműködések keretében fogadtak egy-egy kutatót hosszabb időre. A TUBITAK osztályvezetője (Izmir, Törökország) töltött több hetet intézetükben NKTH együttműködés keretében.

Intézeti kutatók külföldön az EFNUDAT projekt keretében az n-ELBE berendezésen végeztek méréseket, továbbá az NMI3 projekt keretében folyó munkában pedig három alkalommal vettek részt az FRM-II (München) reaktor PGAA berendezésénél.

Egyéb együttműködések keretében négy vezető intézeti kutató NAÜ szakértőként, egyenként több hetet tevékenykedett a Koreai D.K.-ban, és Braziliában. Egyezményes tanulmányút keretében egy kutató dolgozott egy hónapig az Université Libre de Bruxelles-en, nagyaktivitású MnOx katalizátorok vizsgálata közös témájában. Kétoldalú együttműködés keretében 2 kutató kettő, ill. egy hetet töltött Palermóban (Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturali, CNR), 1 kutató 1 hetet Madridban (Istituto de Catálisis y Petroleoquímica).

Nemzetközi és hazai kutatás-fejlesztési intézményi kapcsolatok

A Nemzetközi Atomenergia Ügynökséggel fennálló kapcsolat keretében szoros a szakmai együttműködés a Department of Safeguards Division of Technical Support (SGTS) részlegével, pl. az intézet több alkalommal tartott NAÜ által koordinált szakmai tanfolyamot nukleáris biztosítéki ellenőrök számára. Ugyancsak intézményi a kapcsolat digitális neutronkoincidenziás módszerek fejlesztése terén, ami része a Magyarország részéről a NAÜ számára felajánlott ún. „support program”-nak. Egyúttal ugyanezen fejlesztések a Los Alamos-i kutatóközponttal kialakított együttműködés részét is képezik. Ugyancsak a NAÜ support program része az ún. „LIBS” technika bevezetésével kapcsolatos kutatás-fejlesztés, ami az előző témával együtt része az Országos Atomenergia Hivatal (OAH) által támogatott tevékenységnek is. Az intézet kutatói a NAÜ központjában Bécsben február 19-én szemináriumsorozatot tartottak az intézet nukleáris biztosítéki tevékenységéről (www.iki.kfki.hu/news/iaea_2010_hu.shtml).

Az intézet munkatársai révén képviselteti magát a nemzetközi nukleáris biztosítéki szervezetekben – pl. intézményi tagja az ESARDA-nak (European Safeguards Research and Development Association) és az ITWG-nek.

Ugyancsak 2010-ben jött létre kutatás-fejlesztési együttműködés a Industrial Technology Research Institute (ITRI, Taiwan)-nal a Kémiai Technológiai Transzfer Kft. (CTTCRL) által koordinált „Design of electrocatalysts for anode of Membrane Fuel Cells”-projektben.

A hazai intézményi kapcsolatokban elsősorban az Országos Atomenergia Hivatallal kialakított – és együttműködési szerződéssel is megerősített - kapcsolat említendő. Ez az együttműködés elsősorban a hazai nukleáris biztosítéki és nukleáris törvényszéki tevékenység tudományos háttérét biztosítja az OAH számára. Az intézet munkatársai május 18-án tartották beszámoló előadásukat az Országos Atomenergia Hivatalban (http://www.oah.hu/web/v2/portal.nsf/hirek_hu/902504136F9EF771C12577270048C6C1).

Felsőoktatás - doktori képzés

Az intézet kutatói részt vesznek külföldi és hazai egyetemi képzésben is. Az osztrák-magyar együttműködés keretében két PhD hallgatót fogadtak. Közös katalitikus projektek keretében fogadtak indiai PhD diákot 7 hónapra. Kutatóink mérési lehetőség biztosításával (EFNUDAT) közvetve is hozzájárulnak külföldi diákok diplomamunka és PhD dolgozatainak elkészültéhez. Az intézet munkatársai laboratóriumi gyakorlatokat vezetnek a BME és az ELTE diákjainak, továbbá szakdolgozatok témavezetését is végezték. Külföldi diák is készített MSc szakdolgozatot „Pamut-cellulóz besugárzásos funkcionálisítása” témakörében. Az intézet hat vezető kutatója tagja egyetemek doktori iskoláinak. Öt fiatal intézeti munkatárs védte meg sikerrel intézeti kutatási témában írt PhD értekezését 2010-ben.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Nemzetközi pályázatok

- EU FP 7 (BOOSTER - Bidosimetric Tools for Triage to Responders),
- EU EUREKA pályázatot nyertek el, FRUITRIP elnevezéssel. A kutatás célja háztartási gyümölcsérlelő rendszerek fejlesztése. (2010-2013, 15 millió Ft),
- EU FP7 ERINDA (European Research Infrastructures for Nuclear Data Applications) Az EURATOM pályázatot nyertek ERINDA elnevezéssel. A pályázat célja mérési és adatfeldolgozási lehetőség biztosítása nukleáris adatok mérésére Uniós felhasználók számára. (2010-2013, >9 millió Ft),
- Svájci pályázat (SH 7/2/14), Fenntartható finomkémiai és gyógyszeripar: szerves anyag tartalmú folyékony hulladékok szelekciója és hasznosítása, 2010-. (École Polytechnique Fédérale de Lausanne, EPFL (Lausanne-i Műszaki Egyetem), BME, Fővárosi Csatornázási Művek, Geosan kft együttműködésével. A teljes pályázati támogatás 891 ezer CHF, ebből az intézetre jutó rész 255 ezer CHF),
- NAÜ Koordinált Kutatási Projekt-et (Co-ordinated Research Project, CRP) nyertek el „Radiation treatment of wastewater containing pharmaceutical compounds” témakörben. (2010-2013, évi 4000 Euro), egy másik CRP („Nuclear forensic methods for combatting illicit trafficking of nuclear and other radiocative materials”) hosszabbítást kapott egy újabb évre (12000 Euro).

Hazai pályázatok

- OTKA-NKTH konzorciális pályázatot nyertek el A vízkezelésben használatos új nagyhatékonyságú oxidációs eljárások címmel. (2010-2013, 29,928 millió Ft),
- NKTH elnyert pályázat a „Neutronoptikai és radiográfiai mérőrendszer anyagvizsgálati célokra” (NORMA, 16 M Ft). A pályázat megvalósítását jelentősen késlelteti, hogy semmilyen, a pályázati szerződésben rögzített támogatás nem érkezett az NKTH-tól 2010-ben,
- OTKA: Alacsony hőmérsékletű in-beam Mössbauer mérőrendszerek (2010–2014, 14 MFt).

Az intézet, mint az Országos Atomenergia Hivatal szakértői háttérintézménye több kutatási-szakértői szerződést is készített 2010-ben. Ezek közül a fontosabb jelentések témái:

- urán kimutatása aktív, pulzáló hideg neutronos gerjesztéssel,
- lefoglalt urán-oxid minták nyomelem vizsgálata ICP-MS módszerrel,
- egyedi részecskék izotópösszetételének meghatározása,
- magyarországi uránércben található nyomelemek meghatározása,
- nagy dózisu sugárterekben alkalmazott hermetikus kábelátvezetők vizsgálata,
- a dúsítás mértékének verifikálása atomerőművi friss fűtőelemkazettákban,
- neutronkoincideniás mérési módszerek kidolgozása.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Guczi L, Boskovic G, Kiss E: Bimetallic cobalt based catalysts, Catalysis Reviews: Science and Engineering, 52: 133 – 203 (2010)
2. Györffy N, Tungler A, Fodor M: Stereodifferentiation in heterogeneous catalytic hydrogenation. Kinetic resolution and asymmetric hydrogenation in the presence of (S)-proline: Catalyst-dependent processes. Journal of Catalysis, 270: 2 – 8 (2010)

3. Széles É, Varga Zs, Stefánka Zs: Sample preparation method development for analysis of safeguards swipe samples by inductively coupled plasma mass spectrometry. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 25: 1014 – 1018 (2010)
4. Wojnárovits L, Földváry Cs, Takács E: Radiation-induced grafting of cellulose for adsorption of hazardous water pollutants. A review. *Radiation Physics and Chemistry*, 79: 848 – 862 (2010)
5. Capote R, Herman M, Obložinsky P, Young PC, Goriely S, Belgya T, et al. (23): RIPL - Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations. *Nuclear Data Sheets* (2009), 110(12): 3107 – 3213 (2010)
6. Belgya T. (szerk): EFNUDAT – Slow and Resonance Neutrons. The 2nd EFNUDAT workshop on Neutron Measurements, Theory and Applications, 23-25 September 2009. ISBN: 978 963 7351 19 8, Budapest, Hungary, Institute of Isotopes, 1-174 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Izotópkutató Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	92	Ebből kutató ² :	51
PhD, kandidátus:	22	MTA doktora:	8
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			16

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			107
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			107
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	9	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	3	idegen nyelven: 49
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 40
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 6

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	76,6	Összes független hivatkozás száma:	1250
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1600		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	5	MTA doktora:	1
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			51
		posztterek száma:	34
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	2		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			8
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		311,46	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	5	Teljes saját bevétel:	493,95 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			10
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		20,53	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			3
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,7 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		25,2	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			7
EU forrásból:	7	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	66,34 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			150,77 MFt

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézetben 2010-ben művelt kutatási témáknál kiemelt figyelmet fordítottak a tudományos újszerűségekre, a kutatási feladatok gyakorlati vonatkozásaira, és a társadalom aktuális igényeire.

Témáikban az anyagtudományi és a környezetkémiai vonatkozások komplex módon, egymást kiegészítve jelentek meg. Az anyagtudományi témák szinte mindegyikénél érvényesültek közvetlenül vagy közvetve környezetvédelmi szempontok, mint például: környezetkímélő előállítási technológiák kifejlesztése, alkalmazása; szerkezeti anyagok élettartamának növelését célzó kutatások; biológiailag lebomló komponensek alkalmazása. Az elsődlegesen környezetkémiai témák művelése pedig sok esetben nem fejeződött be a kárenyhítésnél, hanem kiterjedt arra is, hogy a hulladékokat hasznos alapanyaggá lehessen átalakítani.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szilícium-karbid nanopor előállítása rádiófrekvenciás termikus plazmában

Szilícium-karbid (SiC) nanoporokat állítottak elő rádiófrekvenciás termikus plazma reaktorban különböző szilícium- és szénforrások felhasználásával. A kutatás nagy hozzáadott értékű kerámia alapanyag előállítására irányult hulladék anyagok felhasználásával. Kiterjedt kísérleteket folytattak pl. használt gumiabroncsok elgázosítási maradékából képződött szénforrással, valamint pernyékkal, kvarclisztekkel, mint szilíciumforrásokkal. A kísérleteket megelőzően termodinamikai számításokat végeztek a karbotermikus redukció és a karbidképződés optimális hőmérsékleti viszonyainak, és a képződő termékek koncentrációjának meghatározására. Nagy fajlagos felületű, β fázisú SiC porokat állítottak elő, amelyek szemcseméret eloszlása két modulusú volt: nagyobb részt egy nagyon finom, 100-300 nm szemcseméretű, gőzfázisból levált frakcióból, kisebb részt egy 5-50 μ m-es, porózus frakcióból állt. A plazmatechnológiával előállított anyag jellegzetessége, hogy kevés maradék szenet, és elemi szilíciumot is tartalmaz, ezért a további feldolgozás során ún. reakció kötésű szinterelődés is lejátszódik, ami az előállított kerámia test mechanikai tulajdonságait javítja.

A laboratóriumi kísérletekkel megalapoztak egy félüzemi plazmaberendezést, amely részét fogja képezni egy gyártósornak, amit nemzetközi együttműködés keretében, EU finanszírozással a közeljövőben állítanak fel.

Funkcionális szemcsés anyagok előállítása, formálása és elemzése

Funkcionális anyagok mikrokapszulázási lehetőségeit kutatták, és biokompatibilis és biodegradábilis politejsav-glikolsav – bovin szérum albumin (modellfehérje) kompozit nanokapszulákat hoztak létre. A kifejlesztett fehérje típusú anyagokat tartalmazó kompozit gyógyszerformáknak az a különlegességük, hogy mágneses vas-oxid nanorészecskéket is

tartalmaznak, ezáltal a szabályozott hatóanyag-leadás mellett egyúttal célzott gyógyszerbevitelre is alkalmassá válnak.

A Maribori Egyetem Textil Tanszékével együttműködésben fotokróm festékeket nanokapszulákba zártak, hogy ezáltal az élettartamukat és színváltó képességüket megnöveljék. A kapszulázás további előnye, hogy ezek a festékek vizes fázisban szuszpendálhatóvá váltak. A keletkező nanorészecskéket textilanyagok bevonásához használt keverékben diszpergálták. A textilanyagra felvitt bevonatok vizsgálata folyamatban van.

Természetes eredetű hidrokolloid szárítási technológiáját dolgozták ki gejlír típusú szárítóban. Vizsgálták a műveleti paraméterek hatását a termék tulajdonságaira, mint a szemcseméret, a viszkozitás, az optikai forgatóképesség. A laboratóriumi kísérleteket üzemi méretű berendezésre adaptálták, és mára a BUSZESZ Élelmiszeripari Zrt-ben már ezen eljárás alapján folyik a termelés.

Nanorétegek előállítása és vizsgálata

Az iparban (például a mikromechanikában vagy bioanyagként) széleskörűen alkalmazott politetrafluoretilén (PTFE, Teflon) felületét kezelték nitrogén plazma-alapú ionimplantációval, és megvizsgálták az olyan felületi tulajdonságokban előállt változásokat, mint kémiai összetétel, érdesség, abráziós kopás, nedvesedés és felületi elektromos ellenállás. A kutatásaikban az alábbi eredményeket kapták: A kezelés hatására a felület fluortartalma erősen lecsökkent, a felületi fluor/szén (F/C) atomarány fordítottan korrelált az iongyorsító feszültséggel. A felületi átlagérdesség megnőtt, korrelálva a felületi részecskedózással és fordítottan korrelálva az iongyorsító feszültséggel. A kopási térfogat nőtt, elsősorban az érdesség növekedése és a felületi utóoxidáció miatt. A vízzel mért peremszög nőtt kis gyorsítófeszültség és nagy ion dózis alkalmazásakor (az érdesség növekedése miatt), de csökkent nagy gyorsítófeszültség és kis ion dózis hatására (a fluortartalom csökkenése és az oxigén és a nitrogén atomok beépülése miatt). A felületi elektromos ellenállás kb. öt nagyságrenddel csökkent, fordítottan korrelálva az ion dózissal. A feltárt összefüggések lehetőséget nyújtanak a PTFE felületi tulajdonságainak célirányos megváltoztatására.

Rendszereztek a korábban előállított króm, szilícium és volfrám (Cr-, Si- és W) tartalmú gyémántszerű (DLC) szénrétegek tulajdonságait, és a témában összefoglaló közleményt készítettek a Surface and Coatings Technology c. folyóirat speciális kötetéhez.

Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók

Különböző fém nanorészecskék előállításához templátként szolgáló nanofázisú amfifil kotérhálókat, poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliizobutilént valamint poli(N-vinil-imidazol)-l-politetrahidrofuránt alkalmaztak. Vizsgálták a kapott fémtartalmú nanohibridek katalitikus aktivitását és antibakteriális tulajdonságait.

Jól definiált szerkezetű amfifil polimer kotérhálókat állítottak elő kvázielő atomátadásos gyökös polimerizáció és click-kémia kombinálásával. Ennek során propargil telekelikus makromolekulák és azid-csoportot tartalmazó csillag polimerek click-kapcsolásával hoztak létre jól szabályozott szerkezetű kotérhálókat.

Poli(poli(etilén-oxid)-metakrilát)-poliizobutilén triblokk-kopolimer makroiniciátorok-kal elvégezték bifunkciós etilenglikol-dimetakrilát polimerizációját, melynek révén amfifil kotérhálókat állítottak elő. Tanulmányozták ezen új anyagok duzzadási viselkedését és fázistulajdonságait. Előállítottak továbbá újfajta szerkezetű, lineáris poliizobutilén és elágazásos poli(di(etilén-oxid)-metakrilát) szegmenseket tartalmazó amfifil kotérhálókat is.

Előállítottak N-izopropil-akrilamid alapú, intelligens viselkedést mutató kotérhálókat poliizobutilén dimetakrilát és poli(etilén glikol)-dimetakrilát keresztkötőkkel. Vizsgálták ezen anyagok termikus viselkedését, amfifil és hőérzékeny duzzadási viselkedését. Poli(N,N-dietil-akrilamid) mint hidrofil és poli(dimetil-sziloxán), illetve poliizobutilén mint hidrofób komponensek felhasználásával előállított amfifil kotérhálóknál alsó kritikus szételegyedési hőmérsékletet figyeltek meg. Ezekben az újszerű intelligens anyagokban a testhőmérséklethez közeli hőmérsékleteken figyelhető meg a pillanatszerű és reverzibilis átmenet.

Új típusú polimerek kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációval

Kedvező fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkező kopolimereket állítottak elő többféle, gazdaságos és környezetileg előnyös módon, kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációs eljárásokkal. Kereskedelmi forgalomban kapható monomerek (sztirol és (met)akrilátok) polimerizációjával csillag és hiperelágazásos polimereket állítottak elő többféle katalizátorrendszerrel (a katalizátor-koncentrációsökkentése fontos szempont volt), környezetileg előnyös oldószerben (benzotrifluoridban). Az így előállított multifunkciós polimerek jól alkalmazhatók környezetileg előnyös lakkokban és festékekben, valamint jól definiált szerkezetű és tulajdonságú térhálós polimerek kiinduló anyagai lehetnek. Kidolgozták az ilyen polimerek fotopolimerizációval térhálósítható csoportját is, amelyek újszerű fogtömő anyagokként kerülhetnek alkalmazásra.

Poli(poli(etilén-oxid)-metakrilát)-poliizobutilén triblokk-kopolimerekhez kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációval poli(metil-metakrilát) blokkokat kapcsoltak, ezzel számottevően megjavították a korábban vizsgált anyagok mechanikai tulajdonságait. Ily módon rugalmas filmeket állítottak elő.

Funkciós polimerek kationos polimerizációval

A karbokationos polimerizációhoz kapcsolódó kutatások során szabályozott szerkezettel és tulajdonságokkal rendelkező poliizobutilénen és polisztirolon alapuló újszerű makromolekuláris szerkezetek előállítására tettek kísérleteket. Funkciós polimerek előállítása során a láncvégi kettőskötéssel rendelkező poliizobutilének és különböző tiolok reakcióját tanulmányozták, és többféle láncvégi funkciós csoporttal rendelkező polimert kaptak.

Poliizobutilén-poli(para-metilsztirol) blokk-kopolimereket állítottak elő kvázielő karbokationos polimerizációval a monomerek szekvenciális adagolása révén. Ezek az anyagok a poli(para-metilsztirol) blokkok kémiai módosítása révén különleges szerkezetű polimerek szintézise előtt nyithatják meg az utat.

Sztirol és divinilbenzol kopolimerizációjával sikeresen állítottak elő hiperelágazásos polimert egy környezetbarát oldószerben, szobahőmérsékleten és csökkentett katalizátorkoncentráció alkalmazásával. Az előállítás során úgy választották meg a körülményeket, hogy a képződött hiperelágazásos szerkezetű polimerben kettős kötések is maradjanak a beépült bifunkciós monomerből. Ezáltal egy további reakcióba vihető multifunkciós hiperelágazásos makromolekulát kaptak.

Polimerek környezetileg előnyös lebontása és átalakítása

A világon harmadik legnagyobb mennyiségben gyártott polimer, a poli(vinil-klorid) (PVC) degradatív lebontásával és polimer analóg reakcióikkal kapcsolatos kutatásaikkal olyan új eljárásokat dolgoztak ki, amelyek bővíthetik egyrészt a PVC újrahasznosítási lehetőségeit, másrészt egészségi és környezeti szempontokból előnyösebb PVC termékekhez vezethetnek. Sikerrel elegyítettek termooxidatív lebontással nyert PVC-t és biológiai lebomló

politejsavat, és így biológiailag részlegesen lebomló polimer keverékek előállítását alapozták meg.

A PVC feldolgozása során elkerülhetetlen termikus degradációval konjugált kettőskötésű szekvenciákat (poliéneket) tartalmazó PVC-t állítottak elő, majd tanulmányozták ennek módosítását tiol-polién click-reakcióval. Eredményeik alapján ez alkalmas lehet reaktív kettős kötések tartalmazó, erősen elszíneződött PVC-ben a kettős kötések telítésére, ezáltal új szerkezetű, módosított PVC termékek előállítására. Kidolgozták a PVC hatékony azidálását is, amely jelentősen kibővítheti ennek a polimernek click-kémiai eljárásokkal történő módosítási lehetőségeit.

Poliolefinek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása

A poliolefinekkel kapcsolatos munka tovább bővült tudományos, de még inkább ipari partnerekkel. A Tiszai Vegyi Kombináttal (TVK) közös kutatásban a polimerizációs folyamattól az adalékok kölcsönhatásáig több területen vizsgálták a szerkezet-tulajdonság összefüggéseket és a tulajdonságaik módosításának kérdéseit, és javaslatot tettek a jelenlegi megoldások módosítására. A kutatás eredményei közvetlenül hasznosulnak a különböző poliolefin katalizátorainak és adalékrendszerének kidolgozásában, ezzel javítják a TVK versenyképességét. Megállapították, hogy a foszfortartalmú stabilizátorok hatásmechanizmusa függ a vegyület kémiai szerkezetétől, és a foszfinok nagy hatékonysága az oxigéntartalmú gyökök elfogása mellett az oxigénnel való direkt reakció eredménye. Figyelembe véve a társadalmi elvárásokat az egészséges élelmiszerekkel és csomagolóanyagokkal szemben, új kutatást indítottak a jelenleg alkalmazott szintetikus adalékok helyettesítésére természetes antioxidánsokkal. A kutatást az OTKA támogatásával végzik. A Borealis multinacionális céggel folytatott együttműködésben összefüggést állapítottak meg polipropilén és a göcképzők szerkezete és a termék tulajdonságai között. Megállapították, hogy bizonyos kopolimerek ütésállósága háromszorosára növelhető megfelelő típusú és mennyiségű göcképző adagolásával. Megállapították egy új oldódó göcképző hatásmechanizmusát.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Hagyományos töltőanyagot tartalmazó kompozitok vizsgálata újabb információkat eredményezett az ilyen anyagok deformációs folyamatairól. Új módszert dolgoztak ki a határfelületi kölcsönhatások erősségének mennyiségi meghatározására erős adhézió esetén. A természetes erősítőanyagot tartalmazó polipropilén/fa kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusának vizsgálata során megállapították, hogy a tulajdonságokat elsősorban az erősítőanyag szemcsemérete és alakja befolyásolja. A termék tönkremenetele bekövetkezhet a szálak kereszt- és hosszirányú törése, a szemcsék elválása vagy kihúzódása következtében. Megmutatták, hogy a természetes erősítőanyag felületi jellemzői módosításának hatása függ a kezelés jellegétől, az összes tulajdonság egyidejű javítása lehetetlen. Poliamid6/montmorillonit kompozitok vizsgálata rámutatott, hogy bár a deformációs folyamatok függenek a rétegszilikát jelenlététől, ezekben a kompozitokban a mátrix deformációja dominál. A rétegszilikát nanokompozitok kutatásában szerzett tapasztalataikat több könyvfejezetben foglalták össze. Egyre jobban előtérbe kerül a biológiailag lebontható polimerek és társított rendszereik kutatása is. Sikeresen állítottak elő termoplasztikus keményítő nanokompozit filmeket, amelyek szilárdsága többszörösére nőtt az erősítés hatására. A kutatások egy jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

Biomassza anyagok hasznosítását valamint műanyagok újrahasznosítását megalapozó kutatások

Műanyagok pirolízisoldajának katalitikus halogénmentesítési lehetőségeit kutatták, ezen belül tanulmányozták, hogy miképpen alakulnak át egyes halogéntartalmú polimerek hőbomlástermékei zeolit katalizátorokon. Megállapították, hogy az aromás gyűrűhöz kapcsolódó alkil szénatomhoz kötött klórt maradéktalanul el lehet távolítani a molekulákról nátrium zeolitok segítségével. Alkenilklorid azonban csak abban az esetben veszíti el a klór szubsztituensét nátrium zeolit katalizátoron, ha molekula-környezetében könnyen elvonható hidrogén atomok vannak. Az aromás gyűrűhöz kapcsolt klóratom a vizsgált katalizátorok közül csak - az erős krakkoló hatású - Na β zeoliton cserélődik hidrogén atomra. A brómatomok viszont már a kisebb aktivitású NaY zeoliton is részben eltávolíthatók az aromás szénhidrogének molekuláiról.

Az ipari kender lúgos előkezelésével a rostok fellazítását lehet elősegíteni, amely így többféle alkalmazást nyerhet. Használhatják például kompozitokban szálerősítő anyagként, valamint a második generációs bioetanolgyártás alapanyagaként. Különböző körülmények között lúggal (NaOH, KOH) előkezelt kender minták összetételét és hőstabilitását vizsgálták termogravimetria-tömegspektrometria segítségével. Megállapították, hogy a lúgos kezelés egyrészt eltávolítja a hemicellulóz bizonyos funkciós csoportjait, másrészt a maradék alkálifém-ion tartalom befolyásolja a hőbomlás mechanizmusát. Összefüggést állapítottak meg a hőbomlás paraméterei, a kender összetételének változása, valamint az alkálifém-tartalom között főkomponens-analízis segítségével.

Energetikai célokra alkalmazható mezőgazdasági melléktermékek hőbomlási tulajdonságait vizsgálták. Olyan reakciókinetikai leírasmódot dolgoztak ki, amellyel az alkalmazott modellek képesek „megjósolni”, miképpen viselkedne a rendszer a mérések tartományán kívül.

Légkörkémiiai kutatások

Elsőként határozták meg a metil-etil-ke-ton fotobomlási kvantumhatásfokát (Φ) impulzus-lézer fotolízissel 248- és 308 nm hullámhosszon, légköri körülmények között. Megállapították, hogy Φ csökken a hőmérséklet csökkenésekor és ugyancsak csökken a nyomás növelésekor. A kvantumhatásfok adatok reakciókinetikai elemzése alapján megadták a gátmagasságot az első gerjesztett szingulett állapot (S_1) potenciálfelületen, ami $E_{S_1} = 398 \pm 9 \text{ kJ mol}^{-1}$ értéknek adódott. A szerzők, a témában együttműködő Japán kutatók magas szintű kvantumkémiiai számításai alapján egy szokatlan új mechanizmust javasoltak a fotobomlás mechanizmusára, amely egy hidrogén atom vándorlással valósul meg az S_1 felületen. Az eredmények légkörkémiiai fontosságát mutatja, hogy azok a ChemPhysChem folyóirat légkörkémiiai különszámának címlapjára kerültek.

A 2010. évben megjelent közleményekben beszámoltak arról, hogy a N-(4-cianofenil)-karbazol molekula - ellentétben az N-fenil-karbazollal – DMABN4-(dimetilamino)benzonitril (DMABN) típusú kettős lumineszcenciát mutat, ahol a két gerjesztett állapot közötti reakció a femtoszekundum időskálán játszódik le. A triplett gerjesztett specieszekre vezető reakció mindkét származék esetében fontos energiavesztő folyamatnak bizonyult. Megállapították, hogy a pentaciano-(N,N-dimetil)-anilin molekula, ellentétben a várokozásokkal, nem mutat kettős lumineszcenciát, ezzel szemben a szingulett gerjesztett állapot gyors eltűnését egy rendkívül hatékony belső konverzió okozza.

Környezeti elektrokémia

A már szobahőmérsékleten is folyékony szerves sóknak, az ún. ionos folyadékoknak nagy jövőt ígérnek a modern, környezetbarát elektrokémiai technológiák terén. Ezek kidolgozásához alapadatok hiányoznak, melyek meghatározására alap-elektrokémiai méréseket végeztek a következő eredményekkel.

Voltametriás és elektrokémiai impedanciamérésekkel jellemezték az Au(100) egykristály elektródot 1-butil-3-metil-imodazólium hexafluorofoszfát (BMImPF₆) elektrolitban. Meghatározták e rendszer töltésmentes potenciálját. Hőmérsékletfüggő impedancia-mérésekkel a kettősréteg átrendeződésére jellemző kinetikai adatokat kaptak. Megállapították, hogy a ténylegesen mérhető effektusok nem írhatók le az ilyen rendszerek határréteg-dinamikáját értelmező kurrens elméletekkel.

Arany nanorészecskékből kialakított elektroaktív filmek kvantált elektromos feltöltésének/kisütésének kinetikáját vizsgálták négyféle ionos folyadékban, amelyek két-két anion és kation permutációjával állnak elő. Megállapították, hogy az ionos folyadék összetételétől függően a kinetikai gátlás kb. egy nagyságrendnyit változik, ami annak tulajdonítható, hogy az egyes ionos folyadékokban az ionok különböző kémiai állapotban vannak jelen.

Elektrokémiai méréseikhez mérés-technikai fejlesztéseket végeztek: Három különböző, femtoamperes felbontású bipotenciosztátot fejlesztettek ki, melyeket osztrák és svájci laboratóriumokban használt pásztázó elektrokémiai mikroszkóphoz, ill. elektrokémiai atomerőmikroszkóphoz illesztettek.

Poliklórozott aromások roncsolása hőhasznosítással

Megtervezték és elkészítették a "Folyamatos üzemű technológia kifejlesztése poliklórozott aromások dehalogénezése" című NKTH projektben foglalt prototípus üzem kiviteli terveit. Ez a tevékenység magába foglalta a szerkezeti anyagok kiválasztását és azok hőállóságának és korrózióállóságának ellenőrzését a reakció körülményei között; a teljes rendszer fluid-mechanikai jellemzőinek meghatározását elméleti számítások és nagylaboratóriumi modellkísérletek útján; valamint a reakcióhők meghatározását termodinamikai számításokkal különböző típusú és klórtartalmú anyagok betáplálása esetére. A teljesen automatizált, a bruttó reakció exoterm hőjétől függően 100-200 t/év névleges kapacitású prototípus építése jelenleg már a befejezéshez közeledik. A teljes reakció hőjét két gáz-gáz és egy víz-gáz hőcserélőben fogják hasznosítani. A prototípust 2011. márciusában - áprilisában fogják tüzetesen bevizsgálni és optimalizálni. A munka a konzorciumi tagokkal együttműködésben történt.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Részvétel a vörösiszap-katasztrófával kapcsolatos szakértői munkában

Az intézet kiemelkedő feladatot vállalt, és hónapokon keresztül jelentős munkát végzett a 2010. október 4-i vörösiszap-katasztrófa következtében kialakult környezeti károk felmérésében és a lakosság tájékoztatásában.

Az Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság kérésére a Magyar Tudományos Akadémia szakértői csoportjának tagjaiként a Kormányzati Koordinációs Bizottság Tudományos Tanácsának munkájában, mint a munkacsoport vezetője és annak tagja vettek rész az intézet kutatói. A katasztrófa másnapján a Kolontár- és Devecser-környéki gátszakadás területén vett minták gyors elemzése alapján jelentést készítettek a helyzetről, és javaslatot tettek a

legsürgősebb teendőkről: A legfontosabb lépés a lúgos hatás csökkentése volt savas jellegű anyagok kijuttatásával, például gipsz, vas-szulfát, magnézium-szulfát, esetleg kis területen ecetsav és sósav használatával. A kiterített gipsz további jótékony hatása, hogy védőréteggel vonja be a nagyon apró, mindössze néhány mikrométer szemcseátmérőjű vörösiszapot, ami ezzel megakadályozza, hogy a kiszáradt iszapot a szél elhordja.

A katasztrófa után következő hetekben-hónapokban szisztematikus analitikai mérésekkel követték a lúgosság és a toxikus nehézfém-tartalom időbeli, helytől függő és mélység szerinti változását. Ezekbe a munkákba az intézet több laboratóriuma is bekapcsolódott. Megállapították, hogy a katasztrófa környezetében a termőterületek toxikus nehézfémekkel nem szennyeződtek, a talaj felső kb. tíz centiméteres rétegének pH-ja általában három egységgel emelkedett, de a talaj lúgossága az idő előrehaladtával (már négy hét után) természetes folyamatoknak (karbonátosodás) köszönhetően csökkent, és megközelítette az eredeti talajra jellemző pH értéket. A vörösiszappal kapcsolatos korábbi kutatásaik során kidolgozott feldolgozási technológiával a vörösiszap értékes alkotóelemeit külön-külön kinyerve azt gazdaságosan lehetne feldolgozni.

A vörösiszap-katasztrófa első napjaitól kezdődően a kárenyhítés időszakán át az intézet vezető kutatói kb. harminc alkalommal nyilatkoztak a sajtóorgánumoknak, riportokat készített velük Magyarország minden jelentősebb televízió- és rádióhálózata. Újságcikkek nagy száma közölte véleményüket, eredményeiket. Az MTA honlapján folyamatosan frissítették a témával kapcsolatos információit, az MTI részére adott közleményüket pedig a világháló sok honlapja vette át. A Science és a Nature folyóiratokban közölt riportok által pedig az ország határain túl is hallatták hangjukat. Az intézet vezető kutatóinak nagyszámú médiaszereplésével sikerült elérni, hogy a széles közvélemény hiteles forrásból tájékozódhatott az egész országot érintő és a világot érdeklő katasztrófa következményeiről és a kárenyhítés lehetőségeiről.

Középiskolás diákok érdeklődésének felkeltése a kémia iránt

Felsőoktatási intézmények felvételi statisztikáiból ismert, hogy a természettudományos tantárgyak iránti érdeklődés jelentősen csökkent az utóbbi években. Ennek a negatív tendenciának a fékezése érdekében az intézet különböző programokban vett részt.

Az intézet hét kutatója hat budapesti középiskolába látogatott el, ahol népszerűsítő előadásokat tartottak a kémia néhány új területéről a következő témákban: a szén allotróp módosulatai, a biomasza anyagok, a műanyagok újrahasznosítása, a régészeti kutatásokat segítő kémiai eszközök, a legkorszerűbb fogtömő anyagok.

Rendhagyó kémiaórát tartottak egy középiskolai osztálynak. A tanulók ellátogattak az intézet egyik analitikai laboratóriumába, ahol saját kezűleg határozhatták meg a csapvíz összetevőit. Nyílt nap keretében „Tanultunk az elektronszerkezetről. És az mire jó?” címmel egy gimnáziumi osztály diákjainak spektroszkópiai módszereket mutattak be méréseken keresztül.

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem középiskolások részére rendezett „Alkímia ma” sorozatán az intézet egyik vezető kutatójától a „Polimer korszakban élünk: a műanyagoktól a számítógépes chipig, az eldobható napelemekig, a nanotechnológiáig, a génebérszetig, gyógyszerekig és a környezetvédelemig” című előadást hallhatták. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem nyílt napján az "Anyagtudomány: a polimer kompozitok rejtett világa" címmel tartottak előadást a BSc, illetve MSc képzésre jelentkező tanulók és hallgatók számára.

Tehetséggondozás

2010-ben második alkalommal szervezte meg az intézet az „AKI kíváncsi kémikus” kutatótábort, melyen a 25 hazai és a 2 határon túli településről 35 diák vett részt. A kutatótáborba pályázattal jelentkezők közül kiválasztott legtehetségesebb diákok 19 modern kutatási témán dolgozhattak egy héten keresztül témavezetőik irányításával. A kutatótáborhoz az MTA Kémiai Kutatóközpontnak mind a négy intézete hozzájárult témáival és témavezetőivel. A Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézetében 12 diák kutatott az alábbi tématerületeken: reakciósebességek vizsgálata lézerekkel, a világító molekulák világa, archeometriai vizsgálatok, biomassa anyagok, fullerének, lebontható polimer kompozitok, hiperelágazásos és lineáris polimerek előállítása, biokompatibilis polimerek.

Ismeretterjesztés, az intézet népszerűsítése

Az intézet munkatársai egy könyvet és 11 ismeretterjesztő folyóiratcikket jelentettek meg. Az utóbbiak közül három a Magyar Tudományban, egy a Környezetvédelemben, egy az OTKA Magazinban, hat pedig a Kémiai Panoráma című folyóiratban jelent meg.

Az MTV1 Delta című műsorában a polimerek környezeti hatásairól és újrahasznosításáról esett szó az intézet kutatóinak közreműködésével.

Közvetve az intézet ismertségéhez járult hozzá az a 7 cikk is, ami a 2009. évi „AKI kíváncsi kémikus” diákrésztvevőinek tollából született 2010-ben az Élet és Tudomány, a Műanyag és Gumi című folyóiratokban és a Magyar Kémikusok Lapjában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet hazai kapcsolatrendszerének legfontosabb pillére az egyetemekkel való közös kutatómunka. Két egyetemmél, a Pannon Egyetemmél funkcionális nanorészecskék témában és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmél (BME) műanyagok szerkezet – tulajdonság összefüggéseinek vizsgálatában több éve tart és évenként megújul a kapcsolat. Az intézet Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztálya a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék közös szervezeti egysége, a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével pedig közös professzori laboratóriumot működtetnek. A 2010-ben kötött szerződés alapján ebbe a sorba lépett az intézet és az Eötvös Loránd Tudományegyetem új közös laboratóriuma, a Környezeti Kémiai-Fizikai Laboratórium. Nem formális együttműködésben a Semmelweis Egyetemmél sokkomponensű biológiai rendszerekben végeztek analitikai vizsgálatokat a táplálkozásunk és az egészségi állapotunk összefüggéséről. A BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékkal közös OTKA projekten dolgoznak, amelyben a cellulóz alapú bioetanol gyártás hatékonyabbá tételéhez szereznek ismereteket.

Az intézet munkatársai magas óraszámban vettek részt az egyetemi oktatásban. Graduális és posztgraduális előadásokat tartottak, szemináriumokat és laborgyakorlatokat vezettek, továbbá BSc, MSc és PhD hallgatók munkáit irányították a BME Vegyész- és Biomérnöki Karán és az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán. A Semmelweis Egyetemen két PhD hallgató témáját vezetik.

Az egyetemek mellett ugyancsak fontosak a kapcsolatok az MTA kutatóhálózatán belüli intézetekkel, különösen a Kémiai Kutatóközpont intézeteivel.

Tíz magyarországi kis- és középvállalat megbízásából az intézet kutatási és fejlesztési feladatokat, méréseket végzett, többen közülük igénybe vették az intézet akkreditált laboratóriumának szolgáltatásait. Nyolc nagyvállalattal - melyek közül kettő külföldi, kettő pedig multinacionális - áll kapcsolatban az intézet. Jellemzően a tőlük kapott feladatok nagyobb volumenűek és gyakran tudományos igényűek. A megbízási szerződések teljesítésekor az anyagi bevétel mellett esetenként közös publikációkban megmutatkozó tudományos eredmény is elérhető.

Nemzetközi kapcsolatok

Az előző években megkötött és 2010-re áthúzódó kétoldalú egyezmények keretében végzett munkán felül, és a több éve folyó nem formális együttműködéseiken túl 2010-ben az alábbi újonnan indult projekteken dolgoztak az intézet kutatói.

MTA kétoldalú egyezmény keretében szabad gyökök és elemek szerepét vizsgálták gyulladási betegségekben és tumorokban a rigai (Lettország) Stradins University Biokémiai laboratóriumával közösen.

A kristályos szerkezet és a tulajdonságok kapcsolata polipropilénben témakörön belül módszert dolgoztak ki a göcképzők hatékonyságának megállapítására polipropilénben az osztrák Borealis GmbH megbízásából. Oldható göcképző hatásmechanizmusát vizsgálták polipropilénben a svájci Ciba céggel együttműködve.

Polimerek stabilizátorainak hatásmechanizmusát határozták meg a francia Clariant Huningue S.A. vállalattal és a Tiszai Vegyi Kombináttal (TVK) közös munkában.

A társított polimerek közül a töltőanyagot tartalmazó polipropilénben vizsgálták a mikromechanikai deformációs folyamatokat a Leobeni Egyetem (Ausztria) kutatóival. A poliamid6/montmorillonit rétegszilikát nanokompozitok deformációs mechanizmusát a Liege-i Egyetemen (Belgium) közösen tanulmányozták.

Egy szimpóziumot és egy műhelybeszélgetést szerveztek az intézet kutatói 2010-ben. A „Szabad gyökök és mikroelemek” című miniszimpózium 59 aktív résztvevője 23 előadásban számolt be a témában elért legújabb eredményeiről. A termikus szórással kialakított kerámia bevonatok volt a tárgya a Magyar-román Tudományos Műhelynek.

A Marie Curie Akció jóvoltából két fiatal kutató vett részt a „Nanoszerkezetű anyagok és membránok az egészségügyben és az ivóvíz ellátásban” témájú iskolán, melyet a Twentei Egyetem szervezett. Fotokróm festék kapszulázása és textilhez rögzítésével foglalkozott az a munkatárs, aki a Maribori Egyetem vendégkutatója volt. Az intézet egyik vezető kutatója a nanofázisú kotérhálók témájú közös munkájuk miatt utazott a Freiburgi Egyetemre (Németország), egy fiatal kutató pedig biomolekulakkal kapcsolatos irányított polimerizációval foglalkozott a Bázeli Egyetemen (Svájc). Kettős lumineszcenciát mutató rendszerek fotofizikáját kutatta egy munkatárs a Göttingeni Egyetemen (Németország). Hosszú évek óta eredményes munkát folytat az intézet két kutatója az Ulmi Egyetemen (Németország) és a Berni Egyetemen (Svájc), ahol elektrokémiai méréseket végeznek, illetve nagyérzékenyséű műszereket fejlesztenek.

Magnézium-titán (Mg-Ti) ötvözet plazmatermikus előállítására és jellemzése céljából érkezett az intézethez egy török kutató a Közel-Keleti Műszaki Egyetemenről. Az intézet vendége volt a Román Akadémia Makromolekuláris Kémiai Intézetének a kutatója, aki nagy hőstabilitású poliimidekkel foglalkozott. A Hawaii Egyetem (USA) professzora a biomassa hasznosítás kutatása témával rendszeresen visszatérő vendége az intézetnek. A troposzféra halogénkémiajában fontos szerepet játszó elemi reakciók kinetikáját és mechanizmusát vizsgálta intézetünkben a Wroclawi Orvosi Egyetem (Lengyelország) munkatársa.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Fotokróm festék kapszulázása és textilhez rögzítése témájú OTKA pályázatban ez ideig fotokróm festékekből etil-cellulóz és poli(metil-metakrilát) polimerek felhasználásával nanokapszulákat állítottak elő, melyek segítségével jelentősen megnövelték a festékek ultraibolya (UV) abszorbanciájának változását, és fáradással szembeni ellenállását. A projekt ezt követő szakaszában egyszerű eljárással textilekhez fogják rögzíteni a kapszulákat. A projektre 2010-ben 10 millió forintot költöttek, a teljes szerződésállomány 22,3 M Ft.

OTKA pályázat keretében olyan amfifil polimer kotérhálókat állítanak elő, melyek nanohibrid anyagok templátjai és egyben komponensei lesznek. A teljes szerződésállomány 23,8 M Ft, 2010-ben ebből 7,5 M Ft-ot használtak el.

Fizikai és kémiai előkezelések hatását vizsgálják lignocellulózok összetételére és termikus tulajdonságaira. Az OTKA projektre az első évben 0,7 M Ft-ot költöttek, a teljes támogatási keret 7 M Ft.

A Baross Gábor Program 57,5 M Ft-tal támogatta egy plazma szinterelő berendezés beszerzését. A berendezéssel nanoszerkezetű műszaki kerámiákat állíthatnak elő újszerű szinterelési módszerekkel.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Feczkó T, Kokol V, Voncina B: Preparation and characterization of ethylcellulose-based microcapsules for sustaining release of a model fragrance. *Macromolecular Research*, 18 (7): 636-640 (2010)
2. Cakmak G, Károly Z, Mohai I, Öztürk T, Szépölggyi J: The processing of Mg-Ti for hydrogen storage; mechanical milling and plasma synthesis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35: 10412-10418 (2010)
3. Jerabek M, Major Z, Renner K, Móczó J, Pukánszky B, Lang RW: Filler/matrix-debonding and micro-mechanisms of deformation in particulate filled polypropylene composites under tension. *Polymer*, 51: 2040-2048 (2010)
4. Renner K, Móczó J, Suba P, Pukánszky B: Micromechanical deformations in PP/lignocelluloic filler composites: Effect of matrix properties. *Composites Sciences and Technology*, 70: 1141-1147 (2010)
5. Jakab E, Mészáros E, Borsa J: Effect of slight chemical modification on the pyrolysis behavior of cellulose fibers. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 87: 117-123 (2010)
6. Nádasdi R, Zügner GL, Farkas M, Dóbbé S, Maeda S, Morokuma K: Photochemistry of methyl ethyl ketone: Quantum yields and S1/S0-diradical mechanism of photodissociation. *Chemphyschem: a European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry*, 11: 3883-3895 (2010)
7. Mertens SFL, Mészáros G, Wandlowski T: Dynamics of ionic liquid mediated quantised charging of monolayer-protected clusters. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12: 5417-5424 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	113	Ebből kutató ² :	48
PhD, kandidátus:	22	MTA doktora:	9
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			18

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			83
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			68
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	7	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 43
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 35
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 1
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	2	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	86,56	Összes független hivatkozás száma:	1581
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1727		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	3	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	1	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			41
		posztterek száma:	51
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	20	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	14
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			20
Témavezetések száma: TDK munka:	12	Diplomamunka (BSc):	16
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:	28

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	441,11	MFt		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	5	Teljes saját bevétel:	481,06	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			3,61	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			14	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		53,11	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			13	
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	129,43	MFt
Egyéb:	8	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			2	
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	13,47	MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0	MFt

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézet fő kutatási feladata az MTA Kémiai Kutatóközpont E-1287/2010. sz. Alapító okirat módosítása szerint 2010. évben a következő volt:

- innovatív, átfogó kutatások folytatása a kémia és a hozzá kapcsolódó tudományterületeken, amelyek különösen a biomolekuláris kémiára, elsősorban a gyógyszerkémiára vagy finomkémiára szempontból fontos szintézismódszerek kidolgozására, az eredeti heterociklusos szerves vegyületek és szénhidrátok előállítására, ismert és nem ismert célmolekulák alapvető biokémiai és fiziológiai szerepének vizsgálatára, továbbá új diagnosztikai lehetőségek feltárására irányulnak.

Az intézet kutatási alapfeladataihoz kapcsolódóan egyéb feladatokat is ellátott, így:

- tevékenységével összefüggésben tudományos, szak- és ismeretterjesztő kiadványokat jelentetett meg;
- együttműködött a kutatóközponti, illetve más hazai kutatóintézetekkel, velük közös kutatási programokban vett részt, kapcsolatokat tartott fenn és létesített más országok tudományos intézményeivel, nemzetközi tudományos társaságokkal; elősegítette a magyar kémiai kutatások jelenlétét a tudományág nemzetközi életében;
- hazai és nemzetközi tudományos programokat és konferenciákat szervezett, pályázatokat írt ki;
- szorgalmazta és segítette a tudományos kutatások eredményeinek társadalmi és gazdasági hasznosítását;
- felsőoktatási intézményekkel együttműködve részt vett az oktatómunkában, közös kutatási, képzési és továbbképzési feladatokat látott el;
- hazai és nemzetközi kutatási pályázatokon vett részt;
- kutatási megbízási szerződések keretében K+F-tevékenységet végzett;
- hozzájárult a kutatóközponti szakkönyvtár működtetéséhez.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Heterociklusos vegyületek szintézise és vizsgálata

Megoldották a fenotiazinnal szubsztituált diének hidrobórlását, az így képződő új hidroxiszármazékokról kimutatták, hogy azok multidrog-rezisztenciára gyakorolt hatása lényegesen megnő az eddig vizsgált rokon vegyületekéhez viszonyítva.

Külföldi kooperáció keretében extrém rezisztens tuberkulózis baktériumok (XDR-TB) ellen hatékony heterociklusos vegyületeket állítottak elő és teszteltek. Egy lehetséges „lead”-vegyület kiválasztására a közeljövőben sor kerülhet.

Szintetizáltak egy új, bőrtartalmú heterociklust: a tetrazolo[5,1-f][1,2]azaborinint.

Jelentős fluoreszcens hatású izokinolin-származékokat ismertek fel. Az előállításukra jól járható szintézisutat dolgoztak ki.

Biológiailag aktív szénhidrátok szintézise

Elvégezték a korábbi években kifejlesztett alán-Strecker-reakció alkalmazásával képződött diasztereomer glikoaminonitrilek abszolút konfigurációjának meghatározását. Az aminonitrilek ^1H NMR-spektrumának vizsgálata egyértelművé tette, hogy a királis indukcióhoz használt S-(-)-1-feniletiamin fenilcsoportja a diasztereomerek új aszimmetriacentrumán lévő protonokra eltérő mágneses árnyékoló hatással van. Ennek alapján megállapították, hogy a *Re*-oldali addíció termékeiben a fenilcsoport árnyékoló hatása 0,2-0,5 ppm értékkel kisebb kémiai eltolódásokat eredményez. Ezen eredményeket a kristályosítható permetil-glikoaminonitrilek kristályszerkezete igazolta. Az alán-Strecker-reakcióban képződött diasztereomerek közül mindig az volt túlsúlyban, amelyekben az új sztereocentrum kémiai eltolódása kisebb volt. Az S-(-)-1-feniletiaminnak az alán-Strecker-reakció nukleofil addíciós lépésében tapasztalt 1,3-aszimmetrikus indukciója a Felkin-Ahn-moddal írható le.

Oligoszacharidok reakcióinak tanulmányozása

A heparin hatás-szerkezet összefüggés tanulmányozására újabb heparin tetraszacharidot szintetizáltak biológiai vizsgálatok céljára. Ugyancsak biológiai vizsgálatokhoz, további azacukortartalmú heparin-diszacharidokat, a heparánáz enzim új típusú inhibitorait, állítottak elő.

Folytatták a glikozilezési reakciók sztereokémiai eredményét befolyásoló tényezők szisztematikus vizsgálatát. Részletesen vizsgálták a szubsztituensek hatását *D-galakto*, *D-manno*, *D-xilo* és *L-ido* konfigurációjú monoszacharidoknál is. Megállapították, hogy az eredmények a korábban kidolgozott elméleti modell segítségével jól értelmezhetők a vegyületcsoportok esetén is.

Anomális reakciókat tapasztaltak néhány szénhidrát-benzilidén-acetál redukív gyűrűnyitása során. A reakciókat a reagensnek szomszédcsoporthatással történő kelát-képződésével értelmezték.

Neurotoxicitási vizsgálatok céljára több, szénhidráttal módosított dendrimerszármazékot állítottak elő.

Organokatalitikus reakciók tanulmányozása

Az elmúlt hat év során a kutatócsoport egy ún. organokatalitikus kutatási programot alakított ki, amelynek célja kisméretű szerves molekulák katalizátorokként való alkalmazása szerves folyamatokban. Ez az alapjaiban biomimetikus koncepció a kémiai kutatások úttörő területei közé tartozik, célja a katalízis fémeiktől való függésének csökkentése és a folyamatok környezetkímélőbbé tétele.

2010-ben bifunkcionális négyzetamid katalizátorokat fejlesztettek ki. Vizsgálták a katalizátorok működésének mechanizmusát. Az új katalizátorokat dia- és enantioszelektív folyamatokban alkalmazták. Fémmentes hidrogénezésre alkalmas frusztrált Lewis-pár katalizátorokat hoztak létre a méretkizárásos elv alapján.

Természetes szerves anyagok szintézise

Az indolvázias alkaloidokat és alkaloidszerű vegyületeket széles körben használják a gyógyászatban. A kutatócsoport a Richter Gedeon Nyrt.-vel együttműködve már hosszú évek óta foglalkozik ilyen típusú vegyületek szintézisével. 2010-ben egy egyszerű eljárást dolgoztak ki 3,4-diszubsztituált indolból történő sztereoselektív gyűrűzárásra. Ezek a vegyületek ergolinvázias alkaloidok és alkaloidszerű vegyületek előállítására alkalmasak.

Nukleotidkéimiai kutatások

L-arabinózból kiindulva lineáris szintézis-stratégia alkalmazásával 12 új bázismódosított, ill. két referencia pirimidin-L-nukleozidot állítottak elő tumorgátló és antivirális hatásuk vizsgálata céljából. Az említett nukleozidok citosztatikus, ill. anti-leukémiás hatásának tanulmányozása jelenleg folyamatban van. További 6 új, mind bázis-, mind a cukorrészen egyaránt módosított származékot is szintetizáltak. Az említett 20 vegyület széles spektrumú antivirális hatásvizsgálatára nemzetközi együttműködés keretében kerül sor. Tekintve, hogy a D-nukleozidoknál lényegesen nagyobb metabolikus stabilitással és kisebb toxicitással rendelkező L-nukleozidok között számos jelentős és szelektív antivirális hatású analógon található, így az új vegyületek is potenciális antivirális és/vagy tumorgátló szernek tekinthetők.

Neurokéimiai kutatások

Azonosították az új típusú, glutaminsav-felvétellel közvetlenül kiváltható γ -amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamat fiziológiai következményét és a GABA forrását. A NANOTSEN9-projekt támogatásával kifejlesztették az ezen folyamatok közvetlen megfigyelésére alkalmas nanoszenzor "proof-of-concept" prototípusát. Kapcsolódóan – a NANOTRANSPORT projekt keretében – kidolgozták szerves nanohordozók funkcionális neurotoxicitásának új vizsgálati módszereit.

Molekuláris farmakológiai kutatások

Kötődésvizsgálatokkal és molekulamodellezéssel az imatinib (a Glivec márkanevű leukémiellenes gyógyszer hatóanyaga) α_1 -savas glikoprotein (AGP) szérumkomponensen talált erős és szelektív kötődésére kaptak információt. Kimutatták az antimaláriás hatású atovaquone erős kötődését humán szérumalbuminon (HSA).

Kimutatták két emberi akut fázis plazmafehérje, az α_1 -savanyú glikoprotein és a szerin proteáz gátló α_1 -antitripszin ún. chaperon aktivitását. Bizonyították, hogy az α_1 -savanyú glikoprotein fehérjeaggregációt gátló funkciója felfüggeszthető olyan gyógyszerekkel, amelyek a fehérje kötőzsebének nagy affinitású ligandumai. Ezen fehérjék chaperon aktivitásának felismerése két új taggal gyarapítja az extracelluláris tér kóros fehérjeaggregációval szembeni védelmét biztosító dajkafehérjék csoportját, és egyben új megvilágításba helyezi élettani és kóros folyamatokban játszott szerepüket.

Számos királis hatóanyag esetén kimutatták ciklodextrin-származékok, illetve az ezekből újonnan szintetizált monoamino-derivátumok királis elválasztóképességét kapilláris elektroforézissel. β -Laktámok és antimaláriás gyógyszerek esetében új királis elválasztásokat dolgoztak ki. A kölcsönhatások vizsgálata és a kidolgozott módszerek hozzásegítettek ahhoz, hogy új, hatékony, ciklodextrin alapú állófázisokat fejlesszenek ki, melyek alkalmazhatók fontos gyógyszer-hatóanyagok sztereoselektív analitikájában és preparatív elválasztásában.

Elválasztástechnikai módszereket dolgoztak ki nanoszenzor-komponensek vizsgálatára és jellemezték a szenzor fluoreszcenciás sajátosságait.

Neuroszteroidok szelektív hatását mutatták ki GABA-A receptor alfajtákra.

A metabolizmus folyamatainak vizsgálata

Folytatták az ABC transzportereken (ABCC2/3; ABCB11; ABCG2) lejátszódó gyógyszer-interakciók vizsgálatát humán és patkány hepatocita szendvicskultúrában, kibővítve az „uptake” transzportereken (NTCP, OATP) történő interakciók vizsgálatával. Megállapították, hogy a patkány hepatociták uptake transzportereinek expressziója és aktivitása rohamosan csökken az idő függvényében. A humán hepatociták lényegesen jobban megőrzik uptake funkciójukat. Az uptake folyamat egy telíthető aktív és egy nem telíthető passzív folyamat eredőjeként jellemezhető. Kimutatták, hogy az akkumuláció csökkenésének háttérében az aktív, azaz a transzporter mediált uptake csökkenése áll.

Gyógyszer-kölcsönhatások vizsgálata

Diagnosztikai eljárást dolgoztak ki a szervezet gyógyszerlebontó képességének meghatározására, ami lehetővé teszi az egyénre szabott gyógyszeres terápia kialakítását. A diagnosztikai rendszer egyfelől a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő P450 enzimek expressziójának meghatározásán (CYP-fenotipizálás), másfelől a DNS-analízissel megállapítható génhiba kimutatásán (CYP-genotipizálás) alapul. A módszer olyan betegcsoportoknál alkalmazható, ahol több hatóanyagot alkalmaznak, vagy ahol az egyéni gyógyszeres kezelés jelentősen javíthatja az alkalmazott gyógyszerek hatékonyságát és nagyban csökkentheti a toxicitás kockázatát.

Vizsgálták egy koleszterinszármazék (dehidroepiandrosteron) hatását az *in vitro* CYP1A-indukciós vizsgálatokban kapott eredmények matematikai modellezésével. Humán hepatocitákban a dehidroepiandrosteron módosította a CYP1A indukciót. Összehasonlítva a modell alapján, valamint a kísérletek alapján készült CYP1A2 profilt, megállapították, hogy a CYP1A2 indukció csökkenése dehidroepiandrosteron hatására az androgén receptoron keresztül megvalósuló poszt-transzkripciós szabályozás eredménye.

Biooxidációs vizsgálatok

Meghatároztak és jellemezték állati tumorokban jelenlévő, a multidrogr rezisztenciáért felelős transzportereket, különös tekintettel a fotodinamikus terápiára.

Új, a fotodinamikus terápiában alkalmazható vegyületeket teszteltek *in vitro*. Elvégezték az anyagok szerkezet-hatás összefüggések (QSAR) vizsgálatát.

Kemometriai kutatások

Rangsámkülönbségek összegén alapuló, analitikai módszerek és QSAR-modellek rangsorolására szolgáló eljárást fejlesztettek ki. A módszert statisztikai tesztekkel való összehasonlítással validálták.

Kis molekulákra vonatkozó fizikai kémiai és kromatográfiás polaritási jellemzőket hasonlítottak össze és megállapították, melyiket milyen körülmények között lehet használni.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Több napilapnak, rádióknak, illetve internetes portálnak adtak a szakterületüket érintő témákban nyilatkozatokat. Így például a 2010. évi kémiai Nobel-díj kapcsán az intézetben is intenzíven alkalmazott, palládium-katalizált keresztkapcsolásos reakciókról adtak interjút (MTI, Népszabadság, Klub Rádió). A „Nők Lapja Café” internetes rovatában beszámoltak az intézetben futó legfontosabb projektekről.

A Nemzeti Fejlesztési Ügynökség TÁMOP 4.2.3/KMR pályázatára benyújtott “Immerzív kommunikációs csatornák a természettudományos ismeretterjesztés szolgálatában” című projekt keretében részt vettek a *Kémiai Panoráma* ismeretterjesztő folyóirat és a *Kémiai Portál* online magazin szerkesztésében. Létrehozták a *Lángész* című tudományos ismeretterjesztő portált.

Több kutató tartott kémiai ismeretterjesztő előadást budapesti gimnáziumokban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet mind az egyetemekkel, más MTA-kutatóintézetekkel, mind a gyógyszeripar vállalataival igen eredményes kapcsolatokat ápol.

Az intézet kutatói tevékenyen részt vesznek a felsőoktatásban. Ezt igazolja, hogy 13 kutató oktat rendszeresen az egyetemeken és 24 fiatal kutató PhD-munkáját irányítják témavezetőként.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen részt vesznek a Szerves Kémia és Technológiai Tanszék oktatási tevékenységében. Közös kutatásokat folytatnak az „Aszimmetrikus biotranszformációk folyamatos csőreaktorban” c. témában. Az eredményekről egy 2010-ben megjelent közös publikáció tájékoztat.

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) oktatási tevékenységében többféle módon is részt vettek: előadásokat tartottak, és laboratóriumi gyakorlatokat vezettek. Részt vettek az egyetem Kémia Doktori Iskolájának munkájában is.

A Semmelweis Egyetem Gyógyszerészi Kémiai Intézetével együttműködésben részt vettek egy újonnan izolált növényi ekdiszteroid sztereokémiájának tisztázásában. Közös publikációban foglalták össze az eredményeket. Az egyetemen működő MTA Neuromorfológiai és Neuroendokrinológiai Laboratóriummal „A Glu-GABA cserefolyamatban résztvevő célfehérjék anatómiai és immunhisztokémiai lokalizációja” c. témában dolgoznak együtt eredményesen. Az egyetem Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Pathobiokémiai Intézetével és az Uzsoki utcai Kórház Sebészet-Érsebészeti Osztályával „Humán hepatociták izolálása és gyógyszerinterakciók vizsgálata” témában dolgoznak közösen. Az eredményekből közös cikket jelentettek meg.

Részt vettek a Szent István Egyetem Állatorvos-tudományi Kar Doktori Iskolájának munkájában.

Intézmények közötti együttműködési megállapodás keretében több klinikával és kórházzal (Szent István Kórház, Szent László Kórház; Semmelweis Egyetem, Transzplantációs és Sebészeti Klinika, Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika; Gottsegen György Országos

Kardiológiai Intézet, Heim Pál Kórház, Madarász Utcai Gyermekkorház) folytatnak közös munkát. Ennek kapcsán vizsgálják betegek szervezetének gyógyszerlebontó (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a betegek egyéni gyógyszeres terápiáját. Az együttműködés kiemelkedő eredményességét a 14 megjelent közös publikáció igazolja.

Az MTA SzBK, Enzimológiai Intézetével „DNS metilációjának tanulmányozása”, valamint a „K-vitaminok meghatározása vérből” c. témákban a közös eredményekről négy dolgozatban számoltak be 2010-ben.

Több, Magyarországon működő gyógyszervállalattal folytatnak sikeres együttműködéseket. Így például a Servier Kutatóintézet Zrt.-vel és a Richter Gedeon Nyrt.-vel. A Richter Gedeon Nyrt.-vel a neuroszteroidok és a GABA_A-receptor kölcsönhatását tárgyaló dolgozatot jelentettek meg 2010-ben.

A Cyclolab Kft. (Budapest) céggel egy NKTH-Jedlik pályázat keretében dolgoznak közösen. 2010-ben új, hatékony ciklodextrin alapú, királis állófázisokat fejlesztettek ki és ezeket tesztelték, illetve az állófázis funkciók csoportjaként felhasznált és újonnan fejlesztett ciklodextrin származékok ligand-(királis)szelektor kölcsönhatását vizsgálták. Az eredményekről két publikációban számoltak be.

A Creative Labor Kft.-vel a NanoSEN9-projekt keretében: „Sejtvonalak előállítása immunfestési metodika tesztelésére”, a LuminoChem Kft.-vel: „Új Na⁺ ion-szelektív fluoreszcens festékek fejlesztése”, a Nanochem Kft.-vel: „Ultraérzékeny fluoreszcens detektor fejlesztése” c. témákban folytattak közös kutatási-fejlesztési tevékenységet.

A SOLVO Biotechnológiai Zrt.-vel folytatott együttműködésük eredményeként újabb transzporterek szkrínelési technikáját dolgozták ki, és részt vettek egy in vivo patkány hepatobiliáris transzportergátlás vizsgálatában. Az eredményekről közös publikációt jelentettek meg.

2010-ben kutatási együttműködést indítottak a Virtua Drug Kft.-vel egy virtuális laboratórium létrehozásával, amelynek célja az ADME (farmakokinetikai tulajdonságok) becslése, valamint a várható interakciók következtében kialakuló toxikus mellékhatások, illetve a rezisztencia előrejelzése a gyógyszerfejlesztés korai szakaszában, ami jelentős idő- és költségmegtakarítást jelenthet.

Több hazai tudományos rendezvényt is szerveztek. Így pl. a „Fehérjeszimulációk fórumát” 2010. április 22-én tartották meg. Az IUPAC-UNESCO rendezvény, „2011, a Kémia Nemzetközi Éve” megnyitója alkalmából előadást tartottak: „Szerkezet és funkció: célfehérjék validálása az élő sejttől egyetlen molekuláig” címmel.

Tevékeny részt vállaltak a Magyar Állatorvosi Onkológiai Társaság VI. Konferenciájának (2010. június 12-13., Balatonfüred), továbbá a Magyar Szabadgyök-Kutató Társaság az MTA Mikroelem Munkabizottság Miniszimpóziумának (Budapest, 2010. szeptember 17.) megrendezésében.

A Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpóziум (2010. április 14-16., Galyatető), és a TOX-rendezvény (2010. október 13-15., Galyatető) fő szervezői voltak.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet számos külföldi kutatóintézettel folytat eredményes együttműködést.

A kapcsolatok elsősorban közös kutatásokat jelentenek, de több európai egyetem kutatóival is dolgoznak közös pályázati témákban.

Fontos és nagy jelentőségű rendezvény a „Novartis lectures”, amit már hosszú évek óta (évente két alkalommal) az intézetben rendeznek meg. Ezeken a rendezvényeken a legkiválóbb, nemzetközi tekintélyű tudósok tartanak nagy érdeklődéssel kísért előadásokat.

Az intézet több EU-programhoz kapcsolódva rendezett számos külföldi kutató részvételével közös tanácskozásokat. Így pl. az „Exploring Cellular Dynamics at Nanoscale”, az EU FP7 keretprogram által támogatott tanácskozásra került sor 2010. szeptember 8-án.

2010. április 21-én tartották meg hét külföldi és hét magyar előadó részvételével a Multidrog-rezisztencia szimpóziumot.

2010-ben 12 közlemény jelent meg az intézet nemzetközi együttműködéseinek eredményeként.

Az Örmény Tudományos Akadémia Finom Szerveskémi Intézetével együttműködésben az „Új nitrogén-, kén- és oxigéntartalmú, kondenzált heterociklusos vegyületek szintézise és biológiai aktivitása” c. témában egy vendégkutató dolgozott a magyar laboratóriumban, és a partner által szolgáltatott modellvegyületekkel végeztek el új típusú kémiai átalakításokat.

A „Hibrid nanorendszerek inverz gázkromatográfiás és kemometriai jellemzése” c. témában (MTA-Lengyel TA közötti egyezmény keretében, együttműködő partner: Poznani Műszaki Egyetem, Lengyelország) a Hansen-féle oldhatósági paraméterekkel sikerült előre jelezni az oldószer-visszanyerés értékét. Az eredményekről 5 közös cikkben számoltak be.

A „Polaritási indikátorok és a kromatográfiás polaritás értelmezése” c. témában (együttműködő partner: Szentpétervári Egyetem, Oroszország) különböző polaritási jellemzőket értékelték és hasonlítottak össze. Az oldott anyag és oldószer kölcsönhatásokat modellezték mindkét kölcsönható partner szempontjából. Az együttműködés eredményeiről eddig 3 közös cikket jelentettek meg.

Az EU COST program keretében (téma címe: „Reversal of multi drug resistance”) három külföldi egyetemen folytattak közös kutatásokat: University of Lisbon (Portugália), University of Marseille (Franciaország), University of Ankara (Törökország). 2010-ben multidrog-rezisztenciát gátló származékok hatását mutatták ki kísérletileg. Igen fontos kutatási együttműködések alakultak ki az intézet kémiai laboratóriumai és a külföldi biológiai kutatóhelyek között a kiválasztott vegyületek tesztelése céljából.

Magyar-kínai Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Yantai University, Shandong Province, Kína), az „Új antioxidáns klorin vegyületek a rákterápiában” c. témában folytattak kutatásokat. Az eredményekről közös cikkben számoltak be 2010-ben.

Magyar-cseh Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Palaczky University Olomouc, Department of Cell Biology and Genetics, Cseh Köztársaság), a „Glukokortikoid hormonok szerepe az aromás szénhidrogén receptor sejt-szignál működésében humán hepatocitákban” c. témában tanulmányozták a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő citokrom P450 enzimek és a szteroid hormonok közti, valamint a xenoszenzorok és a szteroid szignál útvonalak közti kölcsönhatásokat. A P450 enzimek által biztosított védelmi rendszer megóvjja a szervezetet a xenobiotikumok lehetséges toxikus hatásaitól, amiben meghatározó szerepe van az aromás szénhidrogén-receptornak, valamint a nukleáris receptoroknak (pregnán X-receptor, konstitutív androsztán receptor, glukokortikoid receptor). A receptorfüggő indukción túl endogén faktorok (fejlődési, ivari és hormonális faktorok) is módosítják a P450 expressziót. A szteroid hormonok a gyógyszer-metabolizmus szabályzásához is nagyban hozzájárulnak. A szteroid hormon prekursor

dehidroepiandroszteronnak a CYP1A-indukcióra gyakorolt hatását vizsgálták. Az együttműködés eredményeiből hat közös publikáció született.

Magyar-szlovén TÉT-egyezmény keretében (együttműködő partner: University of Ljubljana, Faculty of Medicine, Szlovénia) „A koleszterin homeosztázis és a gyógyszer-metabolizmus kapcsolatának kísérletes és matematikai modellezése” c. témában tanulmányozták a gyógyszerek okozta koleszterin homeosztázis felborulását, valamint a szteránvázas vegyületek okozta gyógyszer-metabolizmus változásokat. A koleszterinszint-csökkentő sztatinek számos betegnél kellemetlen mellékhatásokat okoznak, ezért új, nem-sztatin alapú megközelítések kerültek előtérbe. Megállapították, hogy a gyógyszer-metabolizmusban szerepet játszó nukleáris receptorok szenzorként működnek, és ezáltal megvalósul a szteránvegyületek metabolizmusának, valamint a xeno- és endobiotikumok okozta toxicitással szembeni védelemnek az összehangolt szabályozása. Az együttműködés hat közös tudományos közleményt eredményezett.

Magyar-horvát TÉT-egyezmény keretében (együttműködő partner: Rudjer Boskovich Intézet, Zágráb, Horvátország) az „Új változószelektálási eljárások kidolgozása” c. témában új rangsorolási és változó kiválasztási eljárásokat fejlesztettek ki és elméleti kémiai konferenciákon vettek részt közös előadásokkal és poszterekkel.

ERA Chemistry pályázat keretében (téma címe: „Hatékony módszerek kidolgozása heparin és heparán-szulfát vegyülettárak előállítására biológiai vizsgálatokhoz”) a Centre for Synthesis and Chemical Biology, University College Dublin, Írország partnerintézményből a részletes kutatási tervek összehangolása érdekében fogadták a külföldi laboratórium vezetőjét. A magyar kutatóhelyről egy fiatal munkatárs végzett eredményes posztdoktori munkát az ír intézetben.

A „Synthesis of biologically active heterocycles” c. témában (együttműködő partner: Bayer Crop Protection, Németország) mintegy 40 új vegyületet szintetizáltak 2010-ben.

„Szelektív halogénezést tartalmazó reakcióutak kidolgozása” c. témában az Allestra Chemie GmbH, Frankfurt am Main (Németország) céggel vettek fel kapcsolatot. 2010-ben sikeres tájékoztató kutatásokat folytattak a későbbi hosszú távú kooperáció megalapozásának céljából.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

2010-ben az MTA-elnöke által meghirdetett Lendület-program keretében a „Frusztrált Lewis-pár katalizátorok” c. témakör kutatásaira 225 M Ft támogatást nyertek el, amely összegből 2010-ben 45 M Ft-ot használtak fel. A 2010-ben végzett munka legfontosabb eredménye a méretkizárásos elven működő, frusztrált Lewis-pár katalizátorok kifejlesztése és alkalmazása.

OTKA-pályázat keretében (téma: „4-, 5-, 6- és 7-klórmethylindolok előállítása és alkalmazásuk indolvázis alkaloidok szintézisében”) a tárgyévben az ergolinvázas alkaloidok szintézisének egy fontos, három gyűrűt tartalmazó intermedierjét állították elő egy egyszerű sztereoselektív módszerrel.

OTKA-kutatások keretében számos olyan eljárást dolgoztak ki, melyekben új módszereket alkalmaztak. Különös hangsúlyt fektettek a palládium-katalizált aminálásra (a „Buchwald-Hartwig-reakció” alkalmazására), valamint egy új szintetizátor felhasználására.

Az „Intelligens nanoszenzor fejlesztése az ionháztartás folyamatainak szubcelluláris szintű diagnosztizálására (nanoSEN9)” c. NKTH-témát konzorciális együttműködés keretében nyerték el. 2010-ben felépítették a fehérjefunkció monitorozására alkalmas nanoszenzor “proof-of-concept” prototípusát.

A pályázati támogatás mértéke: 180 M Ft, ebből 2010-ben 31 M Ft.

„Egyéni gyógyszeres terápia kialakítását támogató, molekuláris diagnosztikai szakértői rendszer és szolgáltatás kidolgozása” (GOP) pályázatot nyerték el, amelynek összes támogatása 200 M Ft, ebből 80 M Ft volt 2010-ben. A tárgyévben elvégezték a CYP-fenotipizálás módszereinek beállítását és validálását, valamint megkezdték a CYP-fenotipizálás módszereinek kidolgozását.

Nemzetközi pályázatok

„Új célpontok és új gyógyszerjelöltek az epilepszia leküzdésére: a gamma-aminovajsav transzport fehérjék altípusainak megkülönböztetésére szolgáló szelektív spirociklusos gátlószerek tervezése” címmel az ERA-2010 Chemistry pályázatot nyerték a Leuveni Katholieke Universitát-tel közösen.

2010-ben nyerték el a „Hatékony módszerek kidolgozása heparin és heparán-szulfát vegyülettáruk előállítására biológiai vizsgálatokhoz” c. ERA 2010 Chemistry pályázatot.

A pályázati támogatás összesen: 35,2 M Ft, ebből 2010-ben 13 M Ft.

2010-ben TÉT-pályázaton „Különböző analitikai és kemometriai módszerek összehasonlítása” c. témára nyerték el támogatást. A pályázati támogatás összesen: 1,460 M Ft, ebből 2010-ben 0,73 M Ft.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Daragics K, Fügedi P: (2-Nitrophenyl)acetyl: A new, selectively removable hydroxyl protecting group. *Organic Letters*, 12 (9): 2076-2079 (2010)
2. Takács D, Király P, Nagy I, Bombicz P, Egyed O, Riedl Zs, Hajós Gy: Formation of a new ring system: Tetrazolo[5,1-f][1,2]azaborinin. *Journal of Organometallic Chemistry*, 695 (24): 2673-2678 (2010)
3. Erős G, Mehdi H, Pápai I, Rokob TA, Király P, Tárkányi G, Soós T: Expanding the scope of metal-free catalytic hydrogenation through frustrated Lewis pair design. *Angewandte Chemie-International Edition*, 49 (37): 6559-6563 (2010)
4. Fitos I, Visy J, Simonyi M, Mády Gy, Zsila F: Selective binding interactions of deramciclane to the genetic variants of human α_1 -acid glycoprotein. *Biochimica et Biophysica Acta*, 1800 (3): 367-372 (2010)
5. Kardos J, Palló A, Bencsura A, Simon Á: Assessing structure, function and druggability of major inhibitory neurotransmitter gamma-aminobutyrate symporter subtypes. *Current Medicinal Chemistry*, 17 (20): 2203-2213 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	92	Ebből kutató ² :	44
PhD, kandidátus:	22	MTA doktora:	6
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			17
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			45
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			44
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	3	idegen nyelven:
			0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
			39
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:
			39
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven:
			1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	139,18	Összes független hivatkozás száma:	932
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1004		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	5	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			14
	posztterek száma:		13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			13
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	24
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		533,46	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	5	Teljes saját bevétel:	133,01
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			6
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	58,55	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			16
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	76,75
Egyéb:	11	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézet fő kutatási feladata az MTA Kémiai Kutatóközpont E-1287/2010. sz. Alapító okirat módosítása szerint 2010. évben a következő volt:

- innovatív, kémiai kutatások folytatása, különösen a nanokémia és a katalízis területén, amelyek magukban foglalják a felületkémiai kutatásokat, nanoszerkezetű anyagok szintézisét, nanorétegek vizsgálatát, felületek jellemzését és módosítását, valamint a heterogén katalizátorok, a katalitikus reakciók és az alternatív energiaforrások kutatását.

Az intézet kutatási alapfeladataihoz kapcsolódóan egyéb feladatokat is ellátott, így:

- tevékenységével összefüggésben tudományos, szak- és ismeretterjesztő kiadványokat jelentetett meg;
- együttműködött a kutatóközponti, illetve más hazai kutatóintézetekkel, velük közös kutatási programokban vett részt, kapcsolatokat tartott fenn és létesített más országok tudományos intézményeivel, nemzetközi tudományos társaságokkal; elősegítette a magyar kémiai kutatások jelenlétét a tudományág nemzetközi életében;
- hazai és nemzetközi tudományos programokat és konferenciákat szervezett;
- szorgalmazta és segítette a tudományos kutatások eredményeinek társadalmi és gazdasági hasznosítását;
- felsőoktatási intézményekkel együttműködve részt vett az oktatómunkában, közös kutatási, képzési és továbbképzési feladatokat látott el;
- hazai és nemzetközi kutatási pályázatokon vett részt;
- kutatási megbízási szerződések keretében végzett K+F-tevékenységet;
- hozzájárult a kutatóközponti szakkönyvtár működtetéséhez.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Nano-medicinális kutatások

Új típusú, felületmódosított, szerves nanorendszereket és szerves nanokompozitokat előállítottak elő a biológiai (szöveti) környezetben is megőrzött stabilitás és biokompatibilitás elérése érdekében. A 20 nm-es átlagos átmérővel rendelkező, szűk méreteloszlású és aminopropil-láncokkal borított monodiszpersz szilika nanorészecskéken további fehérjekapcsolásra alkalmas, bifunkciós felületmódosításokat végeztek. Biokompatibilis polimerrel bevont (fluoreszcens jelzővel ellátott és hatóanyagot tartalmazó szilícium-dioxid-cirkónium-dioxid ($\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$) mag-köpeny) nanorészecskéket állították elő. Elvégezték a termék biológiai környezetben történő tesztelését. Megállapították, hogy daganatos sejtekben a részecskék feldúsulnak.

A célzott hatóanyag-bevitelre alkalmas unilamellás vezikulák héjszerkezetét szinkrotron sugárzással (DESY/Hamburg, BESSY/Berlin), valamint neutronszórással (Müncheni Kutatóreaktor, ILL/Grenoble) tanulmányozva megállapították, hogy a vezikulák sztérikus stabilizálásához felhasznált, PEG-lánccal ellátott foszfolipidekben a kettősréteg külső és belső oldalain beágyazott PEG-lipidek aránya közelítőleg 2:1.

Hazánkban egyedülálló módon összefrekvencia-keltési rezgési spektroszkópiát alkalmaztak lipid monorétegek és oldott anyagok (egyszerű ionok, gyógyszermolekulák, hatóanyag-jelölt peptidek, szerves és szervetlen nanorészecskék) kölcsönhatásainak megismerésére. A módszer alkalmazásával megállapították, hogy tiszta vízre terítve a foszfolipid-molekulák poláris fejcsoportjai a határfelületi vízmolekulák rendezettségét megnövelik, és ez a rendező hatás az anionos dipalmitoil-foszfátidil-glicerín esetében nagyobb, mint az ikerionos dipalmitoil-foszfátidil-kolin esetében.

„In vivo imaging” technikával kimutatták, hogy kettős kinázgátlót, mint tumorellenes szert tartalmazó liposzómák a vizsgálati egerek daganatában feldúsulnak. „Ex vivo imaging”-technikával igazolták a liposzómák jelenlétét a kezelt állatok tumorában és veséjében.

Felületmódosítási és nanoszerkezet-vizsgálatok

Különböző kémiai redukciós és elektrokémiai módszerekkel előállított, arany (Au) nanorészecskékkel borított, interdigitális elektródokat fejlesztettek ki, impedanciamérésen alapuló gáz- és gőzérzékelő szenzorok érzékelő rétegeként. A szenzorok érzékenysége oldószer-gőzök hatására több nagyságrenddel nagyobb, mint az egyenáramú ellenállásmérésen alapuló interdigitális szenzoroké. A kifejlesztett szenzorok válaszideje és regenerációs ideje gyors, a jelváltozás reverzibilis. További előnyük, hogy viszonylag kis felületi borítottság esetén is alkalmazhatók, így a kis anyagszükséglet miatt, az alkalmazás igen gazdaságos.

Vertikálisan rendezett szénnanocső-erdővel borított elektródok szuperkondenzátorként történő alkalmazását vizsgálták. Kidolgozták a szuperkondenzátorok elektrokémiai módszerekkel történő minősítését. Vizsgálták a különböző elektrolitok hatását a kondenzátorok működési paramétereire, így az energiasűrűsége és a teljesítménysűrűsége. Kémiai gőzfázisú rétegleválasztással (CVD) növesztett szén-nanocső rétegekkel 4-10 F/g specifikus kapacitást sikerült elérni, míg a maximális teljesítménysűrűség > 200kW/kg, ami egy nagyságrenddel előnyösebb az aktív szén alapú szuperkondenzátoroknál.

Sikeresen megvalósították a biológiai vizsgálatokban alkalmazható „Lab-on-a-chip” platformba integrálható 3D mikro- és nanoelektrodok galvanikus helyettesítésen alapuló fémes bevonását és a módosított felületek elektrokémiai alkalmazását. A felületmódosítási technika előrelépést jelenthet sejtdifferenciálódási folyamatok valós idejű megfigyelésének követésében.

Meghonosították és sikeresen alkalmazták a mikrométeres lenyomatok technikáját (microcontact printing) lokális fibrinolitikus enzimaktivitás kinetikájának vizsgálatában. A vizsgálatok távlati célja az érrendszeri megbetegedések gyógyítása hatékonyságának növelése.

Összehasonlították különböző gyártmányú nanomechanikai vizsgálóberendezések szisztematikus hibáját. Megállapították, hogy a kiértékelés egységesítésével az átlagos hiba 5% alá csökkenthető. Az eredményeket az ISO szabványosítási eljárásban használják fel.

A korábbi évek alapkutatói eredményeire alapozva, különböző szemcseméretű, illetve morfológiájú titán-dioxid (TiO₂) nanoanyagok alkalmazásán alapuló fotokatalitikus eljárásokat dolgoztak ki. Metilénkék színezék bontását vizsgálva, igazolták, hogy a 10 nm méretű nano TiO₂-anyag hatékonysága azonosnak tekinthető a referenciaanyagként közismerten elfogadott Degussa P25 mintáéval. Ezzel szemben a nagyobb méretű, 100 nm-es TiO₂ jóval hatékonyabbnak bizonyult: már 90 perc alatt 100%-ban elbontotta a metilénkék

színezéket a reakcióelegyből. A fotokatalitikus eljárások tervezése során maximálisan figyelembe vették a későbbi méretnövelés és az ipari körülmények közötti megvalósítás előfeltételeit. Új, szol-gél eljárásokon alapuló preparatív módszereket dolgoztak ki különleges tulajdonságú, pl. elektromos vezetőképességgel rendelkező vagy megnövelt fotokatalitikus tulajdonságú, nanoméretű TiO_2 -anyagok előállítására. Igazolták, hogy a kidolgozott nanokémiai módszerek kiváló alternatívát jelentenek a TiO_2 kristályrács szerkezetének módosítására, idegen atomok, pl. vas, mangán, fluor bevitelével, szemben a már régóta ismeretes fizikai módszerekkel.

Hidrogén-energia kutatások

A hidrogén-energiával kapcsolatos kutatások fő célja a hidrogénnek, mint energiahordozónak előállítása, tisztítása és tüzelőanyag-cellában történő alkalmazása. A 2010-ben végzett kutatások során a hidrogént bioetanol reformálásával állították elő. Magnézium-spinel hordozós nemesfémmentes katalizátorokat terveztek, amelyeknek nikkell (Ni) volt a fő komponense. Ezt többféle fémmel (Co, Ce, Mo) módosították. Az eredmények a Ni és a kobalt (Co) erős szinergetikus hatására utalnak. Röntgen fotoelektron-spektroszkópiás (XPS) vizsgálatok azt mutatták, hogy Co jelenlétében a Ni jobban redukálódik, miközben a Co magasabb oxidációs állapotúvá válik. A katalitikus hatás kifejtésekor bifunkciós mechanizmus valószínűsíthető, ami az egymás atomi közelségében megtalálható fémes nikkell és oxidált kobalt felületi képződményeknek köszönhető. A reformálási reakció első lépésében a fémes nikkelen adszorbeálódó etoxi speciesteket az oxidált kobalt felületi acetálokká és acetátokká oxidálja.

A hidrogén tisztítására, azaz szénmonoxid (CO) mentesítésére az úgynevezett preferenciális oxidációt (PROX) alkalmazták. Olyan modellrendszer kialakításával foglalkoztak, amely rendelkezik a valódi katalizátorok szerkezeti sokszínűségével, ugyanakkor vizsgálható a felületkutatás jól bevált eszközeivel. Vizsgálták CO adszorpcióját ionbombázással feldurvított Au (111) egykristály felületen fotoelektron-spektroszkópiával (XPS, UPS), összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával (SFG) és pásztázó alagútmikroszkópiával (STM). Kimutatták, hogy az ionbombázás által létrehozott nagyszámú lépcső felelős a CO adszorpciójáért, ugyanakkor a CO-expozíció jelentősen megkönnyíti a nagyléptékű felületi anyagtranszportot, ami az ionbombázással feldurvított felület kisimulását eredményezi.

A tüzelőanyag-cellás katalizátorok fejlesztése terén kétkomponensű platina-ón (PtSn)-katalizátorokat állítottak elő. Sikerült jelentős aktivitásnövekedést elérni a referenciaként alkalmazott egyfémű Pt-katalizátorhoz képest.

Mikro- és mezopórusos anyagok kutatása

Vizsgálták nitrogén-oxid (NO) metánnal oxigén jelenlétében, mordenit és ZSM-5 hordozós inidium-(In)zeolit modellkatalizátorokon történő szelektív katalitikus redukálását operando DRIFTS-MS-módszerrel, a katalitikus mechanizmus mélyebb megismerése céljából. Követték a reakciókörülmények, többek között a hőmérséklet és a reaktáns parciális nyomások változtatásának hatását az aktivitásra és a felületi képződmények koncentrációjára. Kimutatták, hogy a zeolitok aktív alakulatai InO^+ -kationok. A reaktáns eleggyel kölcsönhatásban a katalizátoron felületi nitrát(NO_3^-)- és nitrozonium-ionok(NO^+) képződnek. A nitrát a metánnal nitrogéntartalmú intermediert, adott esetben nitrometánt képzett. Az utóbbi reakciólépés a metános NO-redukálás sebességmeghatározó lépése. A NO^+ -ionok és a nitrometán reakciójában környezetre a NO-nál kevésbé ártalmas nitrogén (N_2) és széndioxid (CO_2) képződik.

Szintézisgáz (CO/H₂ elegy) előállítására alkalmas katalizátor és katalitikus reaktorrendszer kifejlesztésével foglalkoztak pirolízis olaj (főleg csontolaj) vízgőzös reformálásának céljából. A reakcióhoz hagyományos, szemcsézett Ni/γ-Al₂O₃-katalizátorokat, továbbá strukturált katalizátorokat készítettek. A strukturált katalizátor méhsejt szerkezetű monolit kerámia-(kordierit)hordozón vékony, aktív Ni/γ-Al₂O₃ réteget hordoz. Előnyös tulajdonsága, hogy áramlási ellenállása sokkal kisebb, anyag és hőátadási jellemzői viszont kedvezőbbek, mint a hasonló aktivitású, szemcsézett katalizátorokból képzett katalizátoragyé. Védőkatalizátor (dolomit) alkalmazásával elérték, hogy a monolit katalizátor aktivitása és a pirolízis gáz teljes konverziója szintézisgázzá hosszú időn át fennmaradjon.

Felületi szerkezetek kutatása

Párhuzamos STM és kisenergiájú ionszórásos spektroszkópiás (LEIS) mérésekkel bizonyították, hogy irányított nukleációval ródium-arany (Rh-Au) mag-héj nanorészecskék hozhatók létre TiO₂ nanocsövek és nanorudak felületén. Ily módon a kétfémes síkkatalizátor rendszerekre korábban kidolgozott eljárásukat kiterjesztették egy komplexebb és ipari alkalmazásként is felhasználható katalizátor típusra.

A kálium és szén-dioxid (CO₂)adszorpcióját és kölcsönhatását vizsgálták Au(111) felületen. Megállapították, hogy a CO₂ kötési energiáját a káliumadalék nagymértékben növeli.

TiO₂ nanoszálakon és nanocsöveken kialakított Rh mag – Au héj szerkezetű katalizátorok aktivitásának vizsgálatával kimutatták, hogy az etanol átalakításában a kétfémes rendszerek aktívabbak, mint az egyfémes Au és esetenként, mint a Rh-katalizátorok.

Jelentős eredménynek számít a CO-mentes hidrogén előállítása hangyasav (HCOOH) bontásával Mo₂C/szén-katalizátorokon. Azt találták, hogy a reakció során a CO₂/(CO+CO₂)-arány 98–99 % szénnanocső felületén létrehozott, vagy Norit felületére felvitt Mo₂C-mintán, de víz hozzáadására sikerült CO-mentes H₂-t előállítani a teljes HCOOH konverzió mellett.

A „Rh-nanodrótok növesztése és rendezett dekorációs TiO_x-film kimutatása TiO₂(110)-felületen növesztett hexagonális Rh-nanorészecskék esetében” c. téma kutatásainak során STM-mérésekkel kimutatták, hogy mind a sztöchiometrikus (1x1), mind (1x2) módon rekonstruált TiO₂(110)-felületen elérhető az egydimenziós növekedés, ha a Rh-fém párologtatása elég magas hőmérsékleten történik. Méréseik alapján bebizonyosodott, hogy magas hőmérsékleten (1000-1200 K) egy új jelenség is fellép, nevezetesen atomi vastagságú, rendezett („wheel” típusu) TiO_x-réteggel vonódik be a TiO₂-felületen növesztett Rh-kristallit.

Nukleáris spektroszkópiai vizsgálatok

Elsőként állítottak elő új típusú, korábban nem ismert, kristályos formában nem létező ón-nikkel-vas [Sn-Ni-Fe]- terner ötvözeteket, speciális paramétereket alkalmazó elektrokémiai leválasztás útján. Ezek az ötvözetek nemcsak korrózióálló bevonatként, hanem akkumulátorok elektródjaiként is gazdaságosan alkalmazhatók lehetnek. Röntgendiffrakciós, valamint ⁵⁷Fe és ¹¹⁹Sn Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálatok alapján megállapították, hogy ezek a rétegek amorfok és ferromágnesesek.

A nanofázisú anyagok kutatásával kapcsolatban tovább folytatták az általuk korábban kifejlesztett, a vas-ftalocianinok pirolízisével történő karbon-nanocsövek előállításával kapcsolatos kutatásaikat, ahol az α-vas ftalocianin oxigenálása során a rétegek közé beépülő oxigének egyik specieszénél az (Fe-O)-láncok között váratlanul megjelenő, új típusú ferromágneses csatolás fellépésére következtettek.

A mikrobiológiai autoregulátorként működő alkilrezorcinoloknál kimutatták, hogy az alkilrezorcinok molekulaszervezete lényeges szerepet játszik a redoxifolyamatok kinetikájában.

Mössbauer-spektroszkópiai mérések segítségével kimutatták, hogy a számítástechnikában alkalmazható, az adalékolt kobaltátokban fellépő negatív mágneses ellenállás jelentősen megváltozik a 20% stronciumtartalmú kobaltátokban a 2,5%-nál nagyobb vashelyettesítés hatására, mivel az addig összefüggő mágneses klaszterek elkülönült mágneses cseppekre esnek szét.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet kutatói aktívan részt vettek – a kémia iránt érdeklődő, kiemelkedő képességű középiskolásoknak szervezett – „Aki kíváncsi kémikus” című nyári kutatótábor lebonyolításában.

A szakemberek és a műszaki kérdések iránt érdeklődők figyelmét ismeretterjesztő cikkekben hívták fel az MTA Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézetben folyó, a megújuló anyag és energiaforrások hasznosításával, valamint a tiszta technológiák bevezetésével és a környezetvédelemmel kapcsolatos munkákra:

Az MTA Kémiai Kutatóközpont által kiadott Kémiai Panoráma c. tudományos ismeretterjesztő folyóirat 2010. évfolyamának 2. számában „Szokatlan kölcsönhatások. Katalízis szilárd felületen” címmel jelentettek meg egy cikket.

A Világgazdaság 2010. július 29-i számában „MTA: jobb az új termék, mint a biodízel” címmel cikk jelent meg a MOL Rt.-vel, a Pannon Egyetemmel és az Olajterv Rt.-vel közösen végzett kutatás-fejlesztésről, melyet a Nemzeti Kutatási és Technológiai Hivatal (NKTH) a Jedlik Ányos program keretében támogatott. A kutatás-fejlesztés célja a növényolaj dízelolajjal egyenértékű „zöld dízelle” történő konvertálása volt.

A Heti Válasz, Innováció rovatában „A biomasszától a biovegyiparig. Füstbe ment energia?” címmel jelent meg cikk a Gazdasági Operatív Program által támogatott, az állati melléktermékek, elsősorban a csontliszt kombinált kémiai és energetikai hasznosítását célzó kutatás-fejlesztésről. A kutatás-fejlesztés vállalkozó partnere a Terra Humána Kft. Az eljárásról részletesebb tájékoztatást adtak a „Gáz üzemanyag biomasszából” című szakcikkben, ami a Magyar Agrárkamara Lapjában az AGRÁRIUM Agrár és Piaccgazdaság című lap 20. évfolyamának 2010/10. számában jelent meg.

Részt vettek a Lángész-projektben, melyben akadémiai kutatók, fiatal tehetségek és professzionális tudománykommunikátorok fogtak össze annak érdekében, hogy a fiatalok, sőt a gyerekek számára is kézzelfogható, átélhető élményt nyújtsanak a tudományos ismeretek, tapasztalatok révén. Előadást és interaktív foglalkozásokat tartottak középiskolákban a nanotechnológiáról. Részt vettek a Tudományfesztiválon, ahol kémiai kísérleteket mutattak be az érdeklődőknek.

Ismeretterjesztő előadásokat tartottak az Eötvös Loránd Tudományegyetemen (ELTE) az „ALKÍMIA MA” előadássorozat keretében, illetve a Paksi Atomerőmű Zrt.-ben „A nukleáris szakemberképzés helyzete Magyarországon, igények és lehetőségek, a fejlődés távlatai” címmel megrendezett ülésen.

„A kémiában is mini a divat – Nanoanyagok a gyógyításban” címmel jelent meg ismertetés a kutatóközpontban folytatott nanomedicinális kutatások jelentőségéről és eredményeiről a Népszabadság 2010. március 27-i számában.

„Új típusú mobiltelefon-cellák magyar kémikusoktól” címmel 2010. július 15-én jelent meg a jelenleg használt akkumulátoroknál jóval hosszabb élettartamú tüzelőanyag-cella kifejlesztéséről szóló tudósítás az MTA honlapján.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai kapcsolatok

A kutatóhely eredményes együttműködéseket folytat mind a hazai egyetemekkel, kutatóintézetekkel, mind több vegyipari és gyógyszeripari vállalattal.

Az egyetemekkel folytatott közös kutatások eredményeiről 2010-ben 26 publikációban számoltak be. Az intézet kutatói közül 12-en vesznek részt rendszeresen az egyetemi oktatásban.

Az elmúlt évben 12 PhD-disszertációt készítő fiatal kutató témavezetését látták el az intézetben. Részt vesznek a Szegedi Tudományegyetem Természettudományi Kar Doktori Iskolájának munkájában is.

A „Fischer-Tropsch reakció vizsgálata” c. téma keretében (együttműködő partner: Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar Nyersanyagelőkészítési és Környezeti Eljárástechnikai Intézete) Co/Al₂O₃-katalizátorokon sikerült alkoholok szintézisét szintézisgázból kiindulva megvalósítaniuk 2010-ben.

A Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémiai Intézetével folytatott együttműködés keretében fibrinolitikus proteázokat tartalmazó vezikulás hordozórendszert fejlesztettek ki, amelynek hatóanyaga bontja mind a tiszta, mind a vérplazma olvadékot. A hatóanyag fibrinszálakra kifejtett méretcsökkentő hatását „in vitro” körülmények között modellezték, ami az alapját képezi a jövőbeni kutatásoknak. A vizsgálatok a hazánkban a legtöbb halálesetet okozó szív és érrendszeri trombózist kiváltó okok feltárására irányulnak.

Az MTA Izotópkutató Intézettel együttműködésben (téma címe: „Inverz oxid/fém határfelületek genezise, jellemzése és alkalmazása modellrendszerben”), OTKA-projekt keretében aranyhordozón létrehozott (vas-oxid)-réteg, úgynevezett „inverz modellkatalizátor” segítségével végeztek az arany/átmenetifém-oxid katalizátorok működési mechanizmusának jobb megértését célzó vizsgálatokat. 2010-ben két közös cikket publikáltak.

A „PEM (proton exchange membran)-típusú tüzelőanyag-cellák ötrétegű MEA (membrane electrode assembly) kutatás-fejlesztése új típusú anód-katalizátorokkal” c. témában partnerük a Kontakt-Elektro Ipari, Kereskedelmi Kft. (Pécs). 2010-ben 40 % Pt-tartalmú szénhordozós katalizátorok előállítására és elektrokatalitikus aktivitásának vizsgálatára került sor. Az előállítás és aktiválás kísérleti változóinak optimalizálása jelenleg folyik. A legjobb katalizátorok lényegesen aktívabbnak bizonyultak, mint a referenciaként alkalmazott, kereskedelmi forgalomban kapható katalizátor.

A pirolízis olaj katalitikus vízgőzös reformálása szintézisgázzá a biomassza kedvezőbb energetikai és szélesebb körű vegyipari hasznosítását megalapozó eljárás. A Terra Humana Kft. az MTA Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézettel közösen – a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség által támogatott „Innovatív bioenergetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus fejlesztés” tárgyú kutatás-fejlesztési munka keretében – katalitikus eljárást fejlesztett ki a pirolízis olaj szintézisgázzá konvertálására vízgőzös reformálással. A magas

hőmérsékletű (700–800 °C) katalitikus folyamatban a bioolaj teljes mennyiségét gáz üzemanyaggá alakítják. A gázt gázmotorban vagy gázturbinában elégetve a kémiai energia jó hatásfokkal mechanikai energiává, illetve generátor alkalmazásával elektromos energiává konvertálható. A fejlesztés eredménye egy új, környezetbarát technológia a megújuló energiahordozó, a biomassza „zöld” elektromos energiává alakítására.

Az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése” c. NKFP-támogatású konzorciális projekt (UWATECH Környezet- és Víztechnikai Kft.) projekt egy 200-20 000 lakos-egyenérték kapacitású, nagy hatásfokú, gazdaságos és környezetbarát kommunális szennyvíz-tisztító technológia kifejlesztésére irányul. A projekt célja a jelenlegi eljárásokban használt részegységeknél (bio-reaktor, levegőztető, iszapleválasztó, vízszagtalanító/fertőtlenítő) hatásosabb és gazdaságosabb berendezések kifejlesztése. Laboratóriumi és nagylaboratóriumi vizsgálatokat végeztek a forgó-merülő szövetekercs, valamint adszorbens alkalmazására biofilm hordozóként. Elkészítették a demonstrációs kísérleti berendezés terveit, beszerezték a referencia berendezésként üzemelő forgó-merülő tárcsás technológia egységeit. Az engedélyezési eljárások befejeződése után megkezdték a demonstrációs és kísérleti szennyvíztisztító építését, a műveleti egységek tervezését gyártását és telepítését Reziben (Zala megye).

A TÁMOP 4.2.1/B4.1 és B4.2 pályázati témákban („Benzinfrakciók további benzol- és aromástartalom csökkentése katalitikus úton”; „Motorbenzinek- és gázolaj-keverőkomponensek előállítása melléktermékként keletkező olefinekből”) a Pannon Egyetem, MK-VFI-MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszékével dolgoznak eredményesen.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek széles körű nemzetközi kapcsolatai vannak; ezek az együttműködések részben egyezményes keretekben, részben egyezményen kívül folynak. 2010-ben 30, külföldi szerzőkkel közös publikációt jelentettek meg.

Az MTA-Bolgár Tudományos Akadémia közötti egyezmény keretében a „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagként” c. témában (együttműködő partner: Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia, Bulgária) két bolgár és két magyar kutató 1-1 hetes látogatását bonyolították le a partner intézménynél.

Három közös publikációt jelentettek meg és egy közös előadást tartottak.

A „Növényi és bakteriális metabolitok fémekkel való kölcsönhatásának vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: Orosz Tudományos Akadémia Biokémiai és Növényélettani Intézet, Szaratov, Oroszország), az MTA-Orosz Tudományos Akadémia közötti egyezmény keretében sikerrel alkalmazzák a Mössbauer-spektroszkópiát a környezeti tényezők mikrobiális jelölésre kifejtett kémiai hatásának a vizsgálatára. Az orosz partnerintézetből két kutató töltött el hosszabb időt a magyar laboratóriumban.

Az együttműködés eddigi eredményeként 2010-ben közös publikációt jelentettek meg és két konferencia-előadást tartottak.

Az „Atomos oxigén adszorpciójának vizsgálata PdAg/Pd(111) felületi ötvözetben, CO ko-adszorpció hatása” c. témában a partnerintézmény (University of Ulm, Németország) meghívására egy fiatal kutató 3 hónapos tanulmányúton vett részt. Olyan kétfémes

modellrendszerek tulajdonságaival ismerkedett meg, melyek tanulmányozása a magyar laboratórium kutatási tervei közt szerepel.

A „Molekuláris kapcsolók vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: Freie Universität Berlin, Németország) egy közös dolgozatot jelentettek meg 2010-ben, és egy rövid (egy hónapos) tanulmányútra is sor került.

MTA-CNR-egyezmény keretében (együttműködő partner: Institute of Nanostructured Materials, National Research Council of Italy, Rome, Olaszország) „A Fischer-Tropsch mechanizmus vizsgálata” c. témában kölcsönös tanulmányutakra került sor. Egy közös publikációt jelentettek meg.

A „Kalkogenid üvegek” c. témában (együttműködő partner: University Uzgorod, Ukrajna), a Visegrádi Alapítvány által finanszírozott együttműködés keretében az Ungvári Egyetemmel gyümölcsöző együttműködés alakult ki a kalkogenid üvegek foto-mechanikus tulajdonságainak tanulmányozása területén. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

Magyar-francia Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: CNRS Le Mans-i Szilárdtestfizikai Kutatólaboratóriuma, Franciaország) a „Kobaltát perovszkitok mágneses fázisátalakulásainak és növények vasfelvételi mechanizmusainak vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” c. témában a partnerek jól kihasználják az egyes laboratóriumokban lévő, egymást kiegészítő feltételeket. A kolosszális mágneses ellenállást mutató mintasorozatokon részletes hőmérsékletfüggő Mössbauer-méréseket végeztek. Az eredményekről közös publikációban és konferencia-előadásban számoltak be.

Magyar-argentin Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Southern National University, Bahía Blanca, Argentína) a „Kálium ad-atom hatásának vizsgálata metanol adszorpciójára β -Mo₂C(001) felületen” c. témában a kísérleti eredményeket az elméleti számításokkal hasonlították össze. Az eredményekről 2010-ben közös publikációt jelentettek meg.

Magyar-argentin Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: INCAPE, FIQ, UNL-CONICET, Santa Fe, Argentína) a „Monolit fém-zeolit katalizátorok fejlesztése” c. témában kölcsönös tanulmányutakra került sor. Három közös publikációban foglalták össze az elért eredményeket és egy közös előadást tartottak.

A 2010-es évben folytatódott az EXCELL (Exploring Cellular Dynamics at Nanoscale) elnevezésű európai projekt, az FP7 NMP – „Nanosciences, nanotechnologies, materials & new production technologies program” keretében. A projekt újfajta megközelítéseket dolgoz ki biológiai anyagok és nanostruktúrák közötti kölcsönhatások feltérképezésére. A projekt eredményeként egy komplex, integrált, mikrofluidikán és nagy érzékenységű elektronikán alapuló platform létrehozása várható, amely alkalmas a sejtdinamika nanotartományban történő követésére. 2010. szeptember 8-10 között Budapesten az MTA Kémiai Kutatóközpont szervezésében, az EXCELL-projekt részeként EXCELLessons címmel előadói napot tartottak a hazai szakemberek és a projektpartnerek részvételével. Az EXCELL-projekten belül szoros együttműködés alakult ki az MTA Kémiai Kutatóközpont és a Dán Műszaki Egyetem között szilíciumfelületek fém és szerves rétegekkel történő bevonásának területén, valamint a Potsdami Egyetemmel membránfehérje-immobilizálás témában.

A „Novel Catalyst for DMFC MEA” c. témában kutatási szerződést kötöttek az Industrial Technology Research Institute (Hsinchu, Taiwan) intézménnyel. (SnPt/C)-katalizátorokat terveztek. Vizsgálták elektrokémiai aktivitásukat metanol elektrooxidációjában. Jelentős aktivitásnövekedést értek el a módosítatlan (Pt/C)-katalizátorhoz képest.

A „Propán szelektív oxidációja” c. témában a Süd Chemie AG (Heufeld, Németország) vállalattal kötött kutatási szerződés keretében MoVTeNb vegyes oxidok kombinatorikus tervezését és katalitikus tulajdonságaik nagyátersztő vizsgálatát végezték el. Azt találták, hogy az akrilsavhozam a legjobb kompozíciókon meghaladja az 50 %-ot.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

2010-ben „A trombus mátrix proteolitikus lebontása: új célpontok és eszközök a trombolízis területén” c. OTKA-pályázatot nyertek el a Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémiai Intézettel közösen. A téma összes támogatása: 37,4 M Ft.

A 2010-ben elnyert OTKA-projekt: „Katalitikus hidrogéntermelés megújuló energiaforrásokból” támogatása összesen: 23,55 M Ft; 2010-ben: 6,04 M Ft.

2010-ben az OTKA-által támogatott „Elektrokémiailag párologtatással, ionkeveréssel és gyorsítással előállított, mikrokristályos, amorf és kristályos ötvözetbevonatok és másként előállított rokonanyagok összehasonlító vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával és egyéb módszerekkel” c. témára összesen 14,6 M Ft-ot, ebből 2010-re 3,6 M Ft-ot nyertek el.

Az OTKA (ERA Chemistry) által támogatott (összesen: 34 M Ft; 2010-ben: 14 millió Ft) „Fe-kelátok és komplexek felvétele és mozgása a rizoszférában” c. témában vashiányos növények vasellátására alkalmazható, természetes Fe-kelátok (Fe(III) és Fe(II)-glükonátok, Fe(III) és Fe(II)-lignoszulfátok) Mössbauer-spektroszkópiai és analitikai mérését végezték el.

OTKA-CNK (kiemelt célzott alapkutatások) -pályázati témával („Önszerveződő lamellás rendszerek szerkezete és dinamikája”) összesen 29 M Ft-ot nyertek el.

Az NKTH-által támogatott Jedlik Á. program egyik témájára („Nanorészecskéhez kötött molekulárisan célzott daganaellenes jelátviteli gyógyszerhatóanyag és kapcsolódó diagnosztika integrált fejlesztése”) 22,9 M Ft-os támogatást nyertek.

A pályázat keretében 2010-ben egy új fejlesztésű rákellenes hatóanyag (EGFR-gátló) liposzómás formuláját állították elő. In vivo képalkotási technikával kimutatták a hatóanyag célzott bejuttatásának sikerességét.

Az „Innovatív bio-energetikai és környezetvédelmi eljárás, ill. prototípus-fejlesztése” c. témára a Terra Humana Kft.-vel közösen nyerték el a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség (GOP 1.1.1.-08 sz.) pályázat támogatását, ami összesen: 27,3 M Ft.

A projektben végzendő kutatások: nemesfém nem tartalmazó, promoteált, hordozós Ni-katalizátor kifejlesztése különböző eredetű és összetételű pirolízis gázok katalitikus, vízgőzös reformálására, a reakció és a katalizátor-regenerálás körülményeinek optimalizálása, a katalizátor formázása, a méretnövelt katalizátor gyártástechnológiájának kidolgozása, katalizátorkészítés a reformáló reaktor prototípusához.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Varga Z, Berényi Sz, Szokol B, Órfi L, Kéri Gy, Peták I, Hoell A, Bóta A: A closer look at the structure of sterically stabilized liposomes: A small-angle X-ray scattering study. *Journal of Physical Chemistry B - Condensed Matter Materials Surfaces Interfaces and Biophysical*, 114(20): 6850-6854 (2010)
2. Paszternák A, Felhósi I, Pászti Z, Kuzmann E, Vértes A, Kálmán E, Nyikos L: Surface analytical characterization of passive iron surface modified by alkyl-phosphonic acid layers. *Electrochimica Acta*, 55: 804–812 (2010)
3. Pászti Z, Hakkel O, Keszthelyi T, Berkó A, Balázs N, Bakó I, Guczi L: Interaction of carbon monoxide with Au(111) modified by ion bombardment: a surface spectroscopy study under elevated pressure. *Langmuir*, 26: 16312-16324 (2010)
4. Boda L, Onyestyák Gy, Solt H, Lónyi F, Valyon J, Thernesz A: Catalytic hydroconversion of tricaprylin and caprylic acid as model reaction for biofuel production from triglycerides. *Applied Catalysis A: General*, 374: 158–169 (2010)
5. Lónyi F, Solt HE, Valyon J, Decolatti H, Gutierrez LB, Miró E: An operando DRIFTS study of the active sites and the active intermediates of the NO-SCR reaction by methane over In,H- and In,Pd,H-zeolite catalysts. *Applied Catalysis B-Environmental*, 100: 133-142 (2010)
6. Dömök M, Oszkó A, Baán K, Sarusi I, Erdőhelyi A: Reforming of ethanol on Pt/Al₂O₃-ZrO₂ catalyst. *Applied Catalysis A: General*, 383(1-2): 33-42 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	105	Ebből kutató ² :	69
PhD, kandidátus:	34	MTA doktora:	11
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			27

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			67
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			66
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 54
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 45
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	118,42	Összes független hivatkozás száma:	1102
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1340		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	4	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			32
		posztterek száma:	22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	28		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			12
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	5	PhD:	12

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		437,51	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	6	Teljes saját bevétel:	327,37 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			8
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		22,62	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			20
NKFP:	9	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	19,23 MFt
Egyéb:	11	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			11
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		189,68	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			6
EU forrásból:	6	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	61,08 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,76 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		0	MFt

Kémiai Kutatóközpont
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67., 1525 Budapest, Pf. 17.
telefon: 1-438 1120; fax: 1-438 1143
e-mail: kubinyi@chemres.hu; honlap: <http://www.chemres.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézet fő kutatási feladata az MTA Kémiai Kutatóközpont E-1287/2010. sz. Alapító okirat módosítása szerint 2010. évben a következő volt:

innovatív kutatások folytatása a kémiában és a hozzá kapcsolódó tudományterületeken, elsősorban a szerkezeti biológia és kémia területén, amelyek különösen: szupramolekuláris kémiai (önszerveződő) rendszerek, fluoreszcens próbák, fotokrom vegyületek, molekulák kölcsönhatásai, molekuláris dinamikai szimulációk és kvantumszimulációk tanulmányozására terjednek ki.

Az intézet kutatási alapfeladataihoz kapcsolódóan egyéb feladatokat is ellátott, így:

- tevékenységével összefüggésben tudományos, szak- és ismeretterjesztő kiadványokat jelentetett meg;
- együttműködött hazai kutatóintézetekkel, velük közös kutatásokat folytatott; kapcsolatokat tartott fenn és létesített más országok tudományos intézményeivel, nemzetközi tudományos társaságokkal; elősegítette a magyar kémiai kutatások jelenlétét a tudományág nemzetközi életében;
- hazai és nemzetközi tudományos programokat és konferenciákat szervezett;
- szorgalmazta és segítette a tudományos kutatások eredményeinek társadalmi és gazdasági hasznosítását;
- felsőoktatási intézményekkel együttműködve részt vett az oktatómunkában, közös kutatási, képzési és továbbképzési feladatokat látott el;
- hazai és nemzetközi kutatási pályázatokon vett részt;
- kutatási megbízási szerződések keretében végzett K+F-tevékenységet;
- hozzájárult a kutatóközponti szakkönyvtár működtetéséhez.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szerkezeti biológiai és kémiai kutatások

A tioszemikarbazon vegyületeket széles körben használják fémionok spektrofotometriás és spektrofluorimetriás kimutatására. Ezeknek a vegyületeknek jelentős biológiai hatása van, így több származék antimaláriás, antibakteriális és antitumor hatású. Komplexképző sajátosságukat azonban rossz oldhatóságuk miatt eddig csak szerves oldószerekben vagy szilárd fázisban vizsgálták. Az intézet kutatói által végzett vizsgálatok célja az volt, hogy 30%-os DMSO-víz oldatban összehasonlítsák néhány tioszemikarbazon ligandum biológiailag fontos fémionokkal (Cu(II), Fe(II), Zn(II)) történő komplexképzését. A paramágneses réz(II)komplexek vizsgálatában a szobahőmérsékleten felvett, ún. „két-dimenziós” ESR-spektrumok megbízható egyensúlyi és szerkezeti információkat nyújtottak. A spektrumfelbontás során a pH-függő spektrumsorozatot együttesen értékelték ki, és

meghatározták a komplexek eloszlását. A vizsgálat kimutatta, hogy az N-metilezett származékok esetén az S-koordináció jelentős vetélytársa lehet a piridin-N koordinációjának, és mind a CuL₂H, mind a CuL₂ összetétel kétféle izomerszerkezetben valósulhat meg. Az ESR-spektrumokban mérhető intenzitáscsökkenés alapján kimutatták, hogy biológiai pH-n kétszeres ligandumfeleslegben a domináns vegyület egy Cu₂L₃ összetételű kétmagvú komplex.

Az oxigén stressz által keltett reaktív oxigén specieszek kimutatására rendkívül hatékony spincsapda eljárást dolgoztak ki, felhasználva a calix-pirrol vegyületek nagy anionaffinitását. A kalix[4]pirrol összekapcsolása ciklikus nitronvegyülettel nagyságrendileg gyorsította meg a szuperoxid szabad gyök csapdázási sebességét.

A maximin-4 nevű, antimikrobiális sajátosságokkal rendelkező peptid mágneses magrezonancia-spektroszkópiai (NMR) vizsgálata során megállapították, hogy mind SDS-micellákban, mind pedig 50% metanol jelenlétében a peptid hélix-kanyar-hélix konformációt ölt. Szilárd fázisú NMR-spektroszkópiai vizsgálatokkal különböző összetételű lipid kettősrétegekben tanulmányozták a peptid orientációját. Azt találták, hogy az aminosav-szekvencia közepén a hélix V alakban megtörik. Az eredmények elősegítik az antimikrobiális peptidek hatásmechanizmusának és a bakteriális szelektivitásuk mögött rejlő tényezők jobb megértését.

NMR-spektroszkópiai módszerekkel tanulmányozták a komplexálatlan és a komplexált humán epesav-kötő fehérje (I-BABP) különböző időskálán zajló belső mozgásait. Megállapították, hogy ligandumkötődés hatására nő a portálrégióval szomszédos hurok rendezettsége a ps-ns időskálán.

Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézettel végzett együttműködésben nemfémes borán/amin hidrogénező, katalitikus rendszerek hőmérsékletfüggő oldat- és szilárd NMR szerkezetvizsgálatát végezték el. Továbbfejlesztették a multinukleáris ¹⁰B és ¹¹B-NMR spektroszkópia méréstechnikai lehetőségeit. Megállapították, hogy a ¹⁰B-NMR-mérések alkalmasak a szabad és datív kötésben lévő boránok arányának és reaktivitásának meghatározására.

Szilárd fázisú ¹H-¹H CRAMPS NMR-módszerekkel termoreszponzív gélek szerkezetvizsgálatát végezték el. A mérések a polimer láncok és az őket stabilizáló molekuláris alkotók között mutattak ki kölcsönhatásokat. Folyadékkristályok és polietiléneket stabilizáló aril-alkil foszfinok bomlástermékeinek szerkezetét határozták meg.

2010-ben a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatok területén organokatalizátorok új komplexeit állították elő, és meghatározták kristályszerkezetüket. Kísérleteik bizonyították a pentavalens germánium létezését. Az irányított szublimáció jelenségét sikerült a parciális izostrukturalitás segítségével megmagyarázniuk.

Tömegspektrometriai mérések értelmezésének céljából, kvantumkémiai módszerekkel megállapították a poli(etilén-oxid)-ok és alkálifém-ionok komplexeinek szerkezetét, az alkálifém-ion kötési energiáját és a legbelső koordinációs héjat alkotó oxigénatomok számát 18-as polimerizációfokig. A kötési energia Li⁺ > Na⁺ > K⁺ > Cs⁺ sorrendben csökken, a koordinációs szám rendre 5, 6, 7 és 11. A kötési energia mindegyik alkálifémnél legalább 12-es polimerizációfokig növekszik. Megállapították, hogy csak a Li⁺ és a Na⁺ esetén van lehetőség arra, hogy a komplex a tömegspektrométerben olyan fragmentációs utakon is bomolhasson, amelyek szerkezeti információt hordoznak; K⁺ és Cs⁺ esetén az egyetlen fragmentációs csatorna az alkálifém-ion ledobása.

A széndioxid (CO₂) vízben való oldódását ab initio metadinamikai módszerrel vizsgálva megállapították, hogy az általánosan feltételezett egy lépéses mechanizmussal szemben a szénsav képződése két elemi lépésen keresztül zajlik, és először bikarbonát képződik. Ennek az eredménynek jelentősége lehet a korábbi kinetikai eredmények értelmezésében, illetve az enzimkatalizált CO₂ megkötés értelmezésében.

Kvantumkémiailag számítások segítségével felderítették egy pirazol alapú N-heterociklusos karbén újszerű gyűrűátrendeződésének mechanizmusát. Az eredmények alapján a gyűrű-felnyílás egy E1cB típusú eliminációnak, míg a gyűrűzáródás egy σ -elektronciklizációs folyamatnak tekinthető.

Klasszikus- és kvantummechanikai reakciódinamikai módszerekkel kiszámították a gerjesztett O₂- és H-atom reakciójának hatáskeresztmetszetét, és megállapították, hogy az égések kémiájában alapvető (H + O₂)-reakció lejátszódását nem segíti elő az O₂-molekula elektrongerjesztése.

Elméleti reakciódinamikai módszerekkel megállapították, hogy a triplett gerjesztett állapotú metán disszociációja során kizárólag CH₃ és H keletkezne, de a CH₃ termék kvantumállapota nem egyezik a kísérletileg észlelhetővel, ezért a triplett állapot részvétele a metán fotodisszociációjában gyakorlatilag kizárható.

Modellszámításokat végeztek az atomi teljes spinek (spin-négyzetek) viselkedésére kötődisszociáció során, valamint aromás és antiaromás rendszerekben.

Extrém mértékben lokalizált nemortogonális lokalizált molekulapályákat definiáltak és programozták be. Az új módszer lehetővé teszi annak meghatározását, hogy egy molekula elektronszerkezetéről alkotott kvalitatív képünk mennyire van összhangban a kapott hullámfüggvénnyel.

Módosított energiadekompozíciós módszert javasoltak, amelyben a hullámfüggvény ionos tagjaira vett korrekció lehetővé teszi, hogy a kapott egy- és kétcentrumos energiakomponensek számszerű értékei közelebb legyenek a kémikusok várakozásához.

Eljárást dolgoztak ki a Stark-effektus figyelembevételére a multifotonos ionizáció egyszerűsített szimulációja során.

Szupramolekuláris kémia, önszerveződő rendszerek tanulmányozása

2010-ben előállítottak és egykristály röntgendiffrakcióval szerkezetileg jellemezték egy olyan arany (Au)(I) makrociklust, melynek kristályrácsa bár nem tartalmaz nagyméretű pórusokat, mégis képes egykristály-egykristály átalakulás során vendégmolekulákat megkötni, majd kiengedni, anélkül, hogy a kristályszerkezet összeomolna. A vendégmolekulák megkötésének és kiengedésének folyamatát egy új mechanizmus segítségével magyarázták.

A globális felmelegedés következményeként mind sürgetőbb a széndioxid-megkötő rendszerek kifejlesztése. Ez az újonnan előállított Au(I) szupramolekula szén-dioxid megkötő rendszerként működhet, hiszen nagy szelektivitással képes a gázt elnyelni, megkötni, majd irányított módon kiengedni. Ezek az eredmények nagymértékben elősegíthetik a nemporózus anyagok vendégmolekula és gázmegkötő tulajdonságának pontosabb megértését.

Funkcionális vegyületek kutatása

A biológiailag funkcionális vegyületek nagyműszeres szerkezetvizsgálata és analitikája témában módszert dolgoztak ki glikoproteinek dúsítására egyszerű ioncserélő, szilárd fázisú extrakciós módszerrel, s azt sikerrel alkalmazták a haptoglobin és complement C3 fehérjék glikozilációs mintázatának keverékből történő megállapítására. Szoftvert fejlesztettek ki a

glikozilációs mintázat kvantitatív jellemzésére, melyet klinikai vérplazma mintákon tesztelnek.

Megállapították a tömegspektrometriában legfontosabb standard anyag, a leucin enkefalin bomlási mechanizmusát, meghatározták a bomlási folyamat aktiválási energiáját és entrópiáját, melyek a jövő számára alapvető referencia adatokként fognak szolgálni.

A sejtek közötti kommunikáció utóbbi években felfedezett különleges esete a mikrovezikulumokon keresztül történő jelátadás. Meghatározták különböző eredetű mikrovezikulumok proteinösszetételét, megállapították, hogy az észlelt alfa-enoláz fehérjekomponens közvetlen kapcsolatban van az egyik legfontosabb népbetegség, a reumatoid arthritis kialakulásával. Ez a felismerés jó kiindulási alapul szolgálhat a betegség diagnosztikájához és gyógyításához.

Különböző micelláris rendszerekben Philips X'Pert diffraktométerrel tanulmányozták a tumorbetegségek kezelésére engedélyezett kemoterápiás szerek hordozóanyagait. Az eredmények azt mutatják, hogy bizonyos hőmérsékletek felett a kvázikristályos szerkezet megszűnik.

2010-ben folytatták az Au(I) – szerves oldószerek kölcsönhatásának vizsgálatát. Az új, klasszikus molekuláris dinamikai potenciál segítségével változatosabb, Au(I)-tartalmú komplexeket tanulmányoztak nemvizes oldatokban.

Klasszikus molekuláris dinamikai potenciálok fejlesztéséhez szükséges elméleti kémiai számításokat végeztek a lantanoida komplexek $[\text{Ln}_2\text{M}_3(\text{oda})_6(\text{H}_2\text{O})_6]$, ahol $\text{Ln}=\text{La}$, Sm és $\text{M}=\text{Cu}$, Co) vizes oldatainak molekuláris dinamikai szimulációjához. Ezek a komplexek nagyon jól oldódnak vízben, ami alkalmassá teszi őket folyadékfázisú röntgendiffrakciós mérések végzésére, valamint az önszerveződés tanulmányozására.

A metanolreformálás során a palládium/cink (Pd/Zn) 1:1-arányú felületi ötvözetén adszorbeálódó részecskék és a felület kölcsönhatási energiáját vizsgálták, a metanolreformálás mechanizmusának jobb megértése céljából. Kimutatták, hogy a Pd(111)-felületen megkötődő Zn-atomok olyan kötőhelyeket preferálnak, melyek esetén a szomszédos Pd-atomok száma maximális. A felületi ötvözet jellemzően (2x1) szerkezetű.

Módszert dolgoztak ki a spiropirán \rightleftharpoons merocianin egyensúly és a merocianin + fémion \rightleftharpoons fémkomplex szimultán egyensúly vizsgálatára. Meghatározták az egyik alapvegyület (6-nitro-BIPS) egyensúlyi állandóit négy fémionnal történő komplex képződésében. Kimutatták, hogy szulfonátokalexarének kiváló hordozóanyagok a rákellenes hatású koralin alkaloidnak. Feltárták az antibakteriális és nemlineáris optikai sajátságokkal rendelkező 4-hidroxi-4'-nitrosztilbén fényelnyelést követő folyamatait és a 2'-nitro szubsztitúció hatását. Alkilmetilimidazólium típusú ionfolyadékok és a kukurbit[7]uril makrociklusos vegyület kölcsönhatásának kalorimetriás vizsgálatával megállapították, hogy a molekulászerkezet változtatása miként befolyásolja a komplexképződés termodinamikai paramétereit.

A kutatóközpont organokatalízis kutatócsoportja által újonnan előállított borán $(\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_2(\text{Mes}))$ különleges reaktivitásának értelmezésére elméleti úton felderítették a frusztrált Lewis sav-bázis pár (FLP) típusú heterolitikus hidrogénhasítás energetikai viszonyait. Megállapították, hogy a reakció sebességét az ún. frusztrált komplex szerkezete alapvetően meghatározza. A $\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_2(\text{Mes})$ borán leányékkolt savas centruma miatt sikeres FLP csak viszonylag kisméretű bázissal kombinálva jöhet létre.

A bullvalén és barbaralén molekulák degenerált periciklikus intramolekuláris átrendeződésének mechanizmusát Born-Oppenheimer molekuladinamikai szimulációkkal

vizsgálva, megmutatták, hogy az aromáság kialakulása az átrendeződés átmeneti állapotában igen erős szervező erő. Szerkezeti, elektronszerkezet és szabadenergia számításokkal igazolták, hogy a ciklikus delokalizáció magas hőmérsékleten is képes a jelentős (gyakran közel 1 Å nagyságú) szerkezeti fluktuációk szinkronizálására és arra, hogy az átrendeződést a koncertikus reakcióúton vezesse.

Car-Parrinello molekuladinamikai számítások és a metadinamikai módszer együttes használatával, az iparilag fontos Wacker-reakció mechanizmusát vizsgálva, megállapították, hogy az ún. külső mechanizmus is összhangban áll mind a reakció kinetikájával, mind pedig a palládium komplex kémiai sajátosságaival, nevezetesen a katalitikusan aktív $[PdCl_2(H_2O)(C_2H_4)]$ komplex sztereo-kémiájával és a ligandumok transz-hatásának versengésével. A vizsgálatok alapján arra következtettek, hogy a sebességmeghatározó lépés nem a hidroxipalladációs lépés.

Multikonfigurációs eljárással meghatározták a CH_2BrCl molekula tripllett elektronállapotait és a szingulett - tripllett állapotok közti spin-pálya csatolásokat.

Összehangolt kísérleti és kvantumkémiai vizsgálatokkal megállapították, hogy alkénvinilborátok cink-dimetil katalizátor jelenlétében nitronokkal *N*-allil-hidroxilaminokat képeznek, és azonosították a valószínű reakcióutat, amely a számítások szerint alkalmas lehet a termékek sztereoselektív előállítására.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet kutatói tevékenyen részt vettek a *Kémiai Panoráma* című, a Kémiai Kutatóközpont kiadásában megjelenő ismeretterjesztő folyóirat szerkesztésében. Ebben több tudományos ismeretterjesztő cikket jelentettek meg az év folyamán.

Az „AKI Kíváncsi Kémikus” című, középiskolásoknak szervezett, tudománynépszerűsítő, a diákok természettudományos pályaválasztását ösztönző, tehetséggondozását és utánpótlás-nevelését segítő, nyári tábor szervezésében több diák dolgozott az intézet laboratóriumaiban, egy-egy hétiig.

Előadást tartottak Cambridge Scientific Database megismertetése céljából a Szegedi Tudományegyetem három intézete számára.

A Baár-Madas Református Gimnáziumban szervezett Tudományos Napon "Hogyan lesz a látható láthatatlan? Molekulaszerkezeti vizsgálatok" címmel középiskolások részére tartottak előadást.

Az intézet kutatói három magyarországi új ásvány (Kabazit-Mg; Ammóniomagnéziovoltaít, Klajit) felfedezésében vettek részt, amiről az MTV híradójában számoltak be.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézetnek széles körű hazai kapcsolatrendszere van. Elsősorban az egyetemi és más akadémiai kutatóhelyekkel folytatnak kutatási együttműködések. Az intézet 18 kutatója vesz részt az egyetemi oktatómunkában. Tíz fiatal kutató készíti PhD-disszertációját az intézetben. 2010-ben 17 publikációt jelentettek meg egyetemi kutatókkal közösen.

Az intézet és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) közös laboratóriumot működtet a lézerspektroszkópiai kutatások területén.

A „Hipervalens vegyületek előállítása, szerkezetvizsgálata és kapcsolódó elméleti kémiai számítások” c. témában a BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszékével dolgoznak együtt. Az egykristály-szerkezetkutatás és az elméleti számítások együttes alkalmazásával hipervalens elemet tartalmazó vegyületek szerkezetét határozták meg. 2010-ben egy közös publikációt jelentettek meg.

A „Szuperkritikus extrakcióval történő rezolválás mechanizmusának felderítése” c. témában a BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék és Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék kutatóival közösen publikálták eredményeiket.

A „Hidrogének biológiailag aktív specieszekkel vizes fázisban történő kölcsönhatásainak vizsgálata” c. OTKA-témában (együttműködő partner: BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék) 2010-ben egy közös közleményt jelentettek meg és egy előadást tartottak.

Az „Antimikrobiális peptidek hatásmechanizmusának vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) Szerves Kémiai Tanszék Peptidkémiai Kutatócsoport) folytatott sikeres közös munka során oldat- és szilárd fázisú NMR-spektroszkópiai vizsgálatokkal különböző összetételű membrán mimetikumokban, illetve lipid kettősrétegekben tanulmányozták a maximin-4 nevű antimikrobiális peptid konformációját és orientációját. A vizsgálatok alapján meghatározták, hogy a peptid bakteriális szelektivitásában jelentős szerepük van az elektrosztatikus tényezőknek. Az együttműködésből 2010 végére két elfogadott publikáció született.

A Szegedi Tudományegyetem Gyógyszer technológiai Intézetével közös kutatásokat folytatnak a „Makromolekuláris hatóanyag hordozó mátrixok és szilárd fázisú készítmények vizsgálata szilárd fázisú NMR-spektroszkópiával” c. témában. 2010-ben egy közös előadásban foglalták össze az újabb eredményeket.

A Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézet részére megbízási szerződés keretében FT-IR-mikroszkóppal speciális méréseket végeztek.

A „Bakteriális flagellum fehérjéinek vizsgálata” c. témában az SZBK Enzimológiai Intézettel és a Pannon Egyetem, Nanotechnológia Tanszékével dolgoznak együtt. NMR-spektroszkópiai módszerekkel tanulmányozták egy vélhetően a flagellum fehérjék transzportjában szerepet játszó szignál peptid konformációját. Megállapították, hogy a peptid preferáltan alfa-hélix konformációjú. Micellás oldatokban végzett vizsgálatok a peptid membránaktivitására utalnak.

Szerződés alapján végzett munka keretében (partnerek: Cyclolab Kft., Fajro Kft.) titándioxid, illetve szilícium-dioxid szuszpenzió szingulettoxigén-termelő képességét vizsgálták. Mérési módszert dolgoztak ki és alkalmaztak fényszóró szuszpenziók jellemzésére.

Megbízási szerződés kapcsán (partnerek: Evo Blocks Kft., Luminochem Kft.) meghatározták számos új anyag molekulászerkezetének és a kísérleti körülmények változtatásának hatását a fluoreszcenciás tulajdonságokra.

Az Izotóp Kft. részére megbízási szerződés keretében spektroszkópiai anyagvizsgálati és minőségellenőrzési szolgáltatást végeztek.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet igen kiterjedt nemzetközi kapcsolatokkal rendelkezik. A kapcsolatok eredményességét mutatja, hogy 2010-ben 35 közös tudományos publikációt jelentettek meg az elért eredményekről.

Az Ukrán TA-MTA kétoldalú megállapodás keretében a „Biomolekulák tömegspektrométerben végbemenő elemi reakcióinak modellezése” c. témában (együttműködő partner: B.Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov, Ukrajna) polimereknek biológiailag aktív vegyületekkel való kölcsönhatását tömegspektrometriai módszerekkel vizsgálva megállapították, hogy az oxietilezett glicerin oligomer, illetve polietilén-glikol képes (pozitív vagy negatív töltésű) komplexeket képezni különböző aminosavakkal, s ezen komplexek szerkezetére is nyertek információkat molekuladinamikai számításokkal. Eredményeiket nemzetközi konferencián mutatták be.

Az „Alkaloidok fény hatására végbemenő folyamatai biológiai fontosságú rendszerekben” c. téma (MTA-DFG-egyezmény, együttműködő partner: Max Planck Institute for Bioinorganic Chemistry, Mülheim an der Ruhr, Németország) keretében feltárták, hogy a mikrokörnyezet sajátosságai és a 2'-nitro szubsztitúció miként befolyásolja az antibakteriális és nemlineáris optikai sajátosságokkal rendelkező 4-hidroxi-4'-nitroszilben fényelnyelést követő folyamatait. Kimutatták, hogy a triplettképződés sebessége csökken, a sugárzásmentes energiavesztés pedig gyorsul a közeg polaritásának növelésekor. Az eredményekről két közös tudományos publikációban számoltak be.

MTA-DFG-egyezmény keretében (együttműködő partner: Institute of Physical Chemistry, Friedrich Schiller University Jena, Németország) a „Halometánok: kvantumkémiai és kvantumdinamikai számítások a fotodisszociáció lézeres szabályzására” c. témában meghatározták a CH_2BrCl molekula triplett elektronállapotait és a szingulett - triplett állapotok közti spin-pálya csatolásokat. 2010-ben két közös publikációt jelentettek meg.

Az „Izostrukturalitás és molekuláris izometritás vizsgálatok” c. téma (együttműködő partner: Institut for Organic Chemistry, Technische Universität Bergakademie Freiberg, Németország) keretében folytatott közös munka során leírták a ritkán vizsgált, laterálisan szubsztituált kalixarének konformációs viselkedésének és zárványkomplex képzésének folyamatát, valamint a fluorszubsztitúció hatását a molekula konformációjára. Két közös cikket publikáltak.

3-Aminopirazol származékokat és azok komplexeit állították elő, jellemezték az anyagok szerkezetét, és elméleti számításokat végeztek a szokatlan szerkezetű Cu(II) és Ni(II) komplexek esetében. A Faculty of Sciences, University of Novi Sad kutatóival közösen két cikkben számoltak be az eredményekről.

MTA-CNRS-egyezmény keretében (együttműködő partner: Laboratoire Léon Brillouin, Saclay, Franciaország) a túlhűtés jelenségét tanulmányozták mezopórusos anyagokban. Különböző zeolitokban és MCM 41-ben abszorbeált túlhűtött víz szerkezetének tanulmányozásával kimutatták, hogy a pórusokban a folyékony víz szerkezetének megfelelő vízfázis található -40°C hőmérséklet közelében. Az eredményeket közös publikációban foglalták össze.

A „Reaktív oxigénspecieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerek: Université de Provence, Marseille, Université Paris Descartes, Franciaország, The Ohio State University, USA) végzett közös kutatások eredményeként négy közös folyóiratcikket jelentettek meg.

A Stockholm University, Department of MMK, Svédország kutatóival „A rezgési spektrumok tanulmányozása kísérleti és kvantumkémiai módszerekkel” c. témában különféle kémiai anyagok IR- és Raman-spektrumainak elemzését és részletes értelmezését végezték el elméleti számítások segítségével.

A Magyar-mexikói Tét-egyezmény keretében művelt „A living polimerizáció ESR-vizsgálata” c. téma eredményeiről (együttműködő partner: Science & Technology of Polymers at CIQA Saltillo Area, Mexikó) négy közös előadást tartottak 2010-ben.

Magyar-osztrák Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: University of Vienna, Ausztria) a „Víz érzékelésére szolgáló fluoreszcens próbák biológiai rendszerek vizsgálatára” c. témában 7-amino-kumarin származékok fotofizikai sajátosságait határozták meg.

Magyar-spanyol Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: Universitat Autònoma de Barcelona, Spanyolország) a vízben lejátszódó katalitikus reakciókat vizsgálták Car-Parrinello metadinamikai szimulációk segítségével. Megállapították, hogy az ún. belső mechanizmus valószínűsége, az etilénsoport erős transz hatása miatt, kicsiny. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A Department of Chemistry and Institute of Computational Chemistry, University of Girona (Spanyolország); University of New Mexico, Albuquerque, NM (USA); Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, IL (USA); Département de Chimie Moléculaire, CNRS-Université Joseph Fourier, Grenoble (Franciaország), Department of Physics, Stony Brook University, New York (USA), Institute of Physical Chemistry, Friedrich-Schiller-University Jena (Németország) és a University of Bari, Olaszország intézményekkel folytatott közös kutatások eredményeiről hét publikációban számoltak be.

Megszervezték a *Magyar Proteomikai Társaság Proteomikai Fórum-át* (2010. május 1-2.), amit Kőszegen tartottak meg. Ugyancsak megszervezték a *28th Informal Meeting on Mass Spectrometry* rendezvényét (2010. május 2-6.) Kőszegen, továbbá részt vettek a *4th Central and Eastern European Proteomic Conference* szervezésében, amit Bécsben tartottak meg 2010. augusztus 29. és szeptember 3. között.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

A „Kémia az életminőség javításért” c. KMOP-téma kutatásainak során (pályázati támogatás 2010-ben 1,4 M Ft) megállapították, hogy a titán-dioxid szuszpenzióban csak a látható tartomány rövid hullámhosszúságú szélén (400 nm környezetében) tapasztalható szingulett oxigénképződés. A szabadon rotáló 7-amino szubsztituenszt tartalmazó kumarinszármazékok gerjesztett állapotának élettartamát a poláros protikus oldószerek nagymértékben lerövidítik, míg a merev struktúrájú 7-amino szubsztituensek esetében az oldószer polaritása és protikus volta csak minimális szerepet játszik a gerjesztett állapot élettartamának befolyásolásában.

A „Nemkovalens kölcsönhatások szerepe biológiai fontosságú vegyületek fényelnyelés hatására végbemenő folyamataiban” c. OTKA-téma támogatása összesen: 13,4 M Ft, amiből 3,35 M Ft jutott 2010-re.

Az eddig elvégzett kutatások eredményeként kimutatták, hogy a 4-szulfonátok alixarének kiválóan alkalmasak gyógyszerhatóanyag hordozóként, mert például a rákellenes korallin-alkaloid molekulái közül annyit képesek megkötni, amennyi a makrociklus aromás csoportjainak a száma. Igazolták, hogy a 4'-nitro- és a 2',4'-dinitro-szubsztituált 4-hidroxisztilbének fotokémiai izomerizációja elsősorban triplétt gerjesztett állapoton keresztül megy végbe. Megállapították, hogy hidrogénhíd-akceptor jellegű anyagok nagymértékben gyorsítják a szingulett gerjesztett állapot energiavesztését.

A „Bioligandumok fémkoordinációjának termodinamikai vizsgálata ESR-spektroszkópiával” c. OTKA-témában néhány nyíltláncú: Ac-HPHPH-CONH₂, Ac-KHPHPHQ-CONH₂, Ac-HHPHG-CONH₂, Ac-HHPHGHPHG-CONH₂, illetve elágazó láncú: (NH₂-His)₄(Lys)₂Lys-CONH₂, (NH₂-His-His)₂Lys-CONH₂, (NH₂-His-Gly)₂Lys-CONH₂ peptid típusú metalloenzim modellvegyületet állítottak elő. Ezek oldatbeli egyensúlyi vizsgálata és oldatszerkezetének tanulmányozása részben már megtörtént. Ezen oligopeptideknél nagyobb tagszámú fémkötő peptidokat állítottak elő biológiai módszerek segítségével. A tisztításra eredményes eljárásokat dolgoztak ki. CD és fluoreszcencia-spektroszkópiás, valamint tömegspektrometriás módszerekkel tanulmányozták a fémion-megkötő sajátságokat elsősorban cink(II)ionnal.

A témára fordítható összes támogatás: 4 M Ft, ebből 2010-ben: 1,15 M Ft.

„A sejtek közötti kommunikáció újonnan azonosított mikrovezikulum-útjának vizsgálata” c. OTKA-témában a fehérjéknek a mikrovezikulumokból történő kinyerésére általuk korábban kidolgozott mintaelőkészítési eljárást továbbfejlesztve, miniaturizálták az eljárást, és csökkentették a mintaelőkészítéshez szükséges időt. A Jurkat T-sejtekben sikerült kimutatniuk és azonosítaniuk 70 peptidet az eddig leírt 7 peptiden kívül.

A pályázati támogatás összesen: 24 M Ft, amiből 6 M Ft jutott 2010-re.

2010-ben „Önszerveződő aranyvegyületek szintézise és szerkezeti jellemzése különböző módszerekkel: röntgendiffrakció, NMR” c. OTKA-pályázatot nyertek.

A pályázat összes támogatása 16 M Ft, ebből 2010-ben: 3,8 M Ft.

Az újonnan előállított [Au₂(*cisz*-dppe)₂](NO₃)₂ (*cisz*-dppe = *cisz*-1,2-bis((difenilfoszfin)etilén) arany(I) difoszfín komplexnek a kristályrácsa bár nem tartalmaz nagyméretű pórusokat, mégis képes vendégmolekulákat megkötni, majd kiengedni anélkül, hogy a kristályszerkezet összeomolna. Ez az arany(I) vegyület nagyon hatékony a CO₂ elnyelésében, megkötésében és irányított módon történő kiengedésében is.

OTKA-pályázatot nyertek el „A Reinecke só szupramolekuláris kémiája” c. téma kutatásaira. A támogatás összesen: 14 M Ft, ebből 2010-ben: 4 M Ft.

Új ferrocénium sókat állítottak elő. Több metatézis reakcióval egykristály-diffrakciós kísérletre alkalmas kristálymintákat növesztettek és meghatározták szerkezetüket.

Nemzetközi pályázat

Az FP6-Marie Curie Early Stage Researcher Training projekt keretében (téma címe: „Polymer characterisation using electron capture dissociation and collision-induced dissociation multistage mass spectrometry”) a polimer fragmentáció tömegspektrometriai és elméleti vizsgálatában elért eredményeit az "Energetics of cationized PEG oligomers: a mass

spectrometric and theoretical size dependence study" című dolgozatban összegezve PhD fokozatot szerzett a kutatócsoport egyik fiatal kutatója.

A pályázati támogatás összesen: 18 M Ft volt, amiből 6 M Ft jutott 2010-re.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kim SU, Liu Y, Nash KM, Zweier JL, Rockenbauer A, Villamena F: Fast reactivity of a cyclic nitron-calix[4]pyrrole conjugate with superoxide radical anion: Theoretical and experimental studies. *Journal of the American Chemical Society*, 132(48): 17157-17173 (2010)
2. Faigl F, Mátravölgyi B, Erdélyi Zs, Pál K, Hessz D, Kubinyi M: Synthesis and resolution of 4,4,6,6-tetramethyl-4H,6H-pyrrolo[1,2-a][4,1]-benzoxazepine-1,10-dicarboxylic acid. *Tetrahedron: Asymmetry*, 21(24): 2920-2924 (2010)
3. Megyesi M, Biczók L: Considerable change of fluorescent properties upon multiple binding of coralyne to 4-sulfonatocalixarenes. *Journal of Physical Chemistry B*, 114(8): 2814–2819 (2010)
4. Király P, Varga Sz, Vakulya B, Soós T, Tárkányi G: Self-association promoted conformational transition of (3R,4S,8R,9R)-9-[(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)-thiourea](9-deoxy)-epi-cinchonine. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 48(1): 13-19 (2010)
5. Bombicz P, Kovács I, Nyulászi L, Szieberth D, Terleczy P: Neutral pentacoordinate group 14 compounds with beta-diketonato ligands. *Organometallics*, 29(5): 1100-1106 (2010)
6. Memboeuf A, Nasioudis A, Indelicato S, Pollreisz F, Kuki A, Kéki S, van den Brink OF, Vékey K, Drahos L: Size effect on fragmentation in tandem mass spectrometry. *Analytical Chemistry*, 82(6): 2294-2302 (2010)
7. Pászti Z, Hakkell O, Keszthelyi T, Berkó A, Balázs N, Bakó I, Guzzi L: Interaction of carbon monoxide with Au(111) modified by ion bombardment: A surface spectroscopy study under elevated pressure. *Langmuir*, 26(21): 16312-16324 (2010)
8. Deák A, Tunyogi T, Károly Z, Klébert Sz, Pálinkás G: Guest escape and uptake in nonporous crystals of a gold(I) macrocycle. *Journal of the American Chemical Society*, 132(39): 13627-13629 (2010)
9. Erős G, Mehdi H, Pápai L, Rokob TA, Király P, Tárkányi G, Soós T: Expanding the scope of metal-free catalytic hydrogenation through frustrated Lewis pair design. *Angewandte Chemie International Edition*, 49(37): 6559-6563 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	57	Ebből kutató ² :	35
PhD, kandidátus:	15	MTA doktora:	9
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			10

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			63
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			61
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 58
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 58
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	200,24	Összes független hivatkozás száma:	1506
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1882		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	8	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			18
		posztterek száma:	13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			18
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	10

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	344,1	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	5	Teljes saját bevétel:	54,11 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			18
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		18,66 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			9
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	24,04 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0,4 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

KFKI ATOMENERGIA KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33., 1525 Budapest, Pf. 49.

telefon: 1-395 9159; fax: 1-395 9293

e-mail: gado@sunserv.kfki.hu; honlap: www.kfki.hu/~aekihp/

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az intézet kutatási koncepciójának megfelelően működött (e koncepció nem változott az elmúlt év során) azaz hármas célt szolgált: a jelen igényeinek megfelelő nukleáris biztonsággal kapcsolatos kutatások, a Magyarországon létesítendő új atomerőmű blokkok előkészítése, a jövő energiatermelésének megalapozása: negyedik generációs atomreaktorok és magfúzió által. Ma még a nukleáris biztonsággal kapcsolatos kutatások az elsődlegesek, de a másik két terület jelentősége egyre nő.

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

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Reaktorfizikai és "multi-physics" kutatások (6 kutató)

A jelenlegi és a közeljövőben létrehozandó reaktorok más energia-termelési módokkal versenyképes és egyben biztonságos üzemeltetésének feltétele a normál üzemi és üzemzavari limitiek és biztonsági sávok megalapozott, de nem túlzottan konzervatív kijelölése. A sávokhoz konfidencia szintek, valószínűségek tartoznak. Tovább folytatódott azoknak a módszereknek a kidolgozása, melyek révén ezek az adatok kiszámíthatók úgy a normál üzem, mint az üzemzavarok esetén. Ennek során az AEKI részt vesz az OECD NEA jelenleg folyó, hasonló célú együttműködéseiben, így a kritikussági biztonsági elemzések területén a „burnup credit” témával foglalkozó WPNCs OECD NEA munkacsoport tevékenységében (lásd alább), valamint az OECD NEA WPRS UAM („Uncertainty Analysis in Modeling”) együttműködésben. Az utóbbi együttműködés keretében saját módszert dolgoztak ki, és ezzel meghatározták a saját fejlesztésű KARATE programrendszernek a magadatok hibájából származó bizonytalanságát a VVER-1000 cella és köteg reaktorfizikai számításának esetére.

A kiégett fűtőelemek tárolására és szállítására szolgáló kritikussági számítások bizonytalanságát döntően a felhasznált magadat könyvtárak hibája szabja meg. Ezek hatását egy konkrét alkalmazás számított sokszorozási tényezőjére a vizsgált alkalmazáshoz hasonló kritikus kísérletek vizsgálatából lehet meghatározni. Ha a kritikussági számítás során figyelembe veszik a fűtőelem kiégéssel járó összetétel változását (burnup credit), akkor hasonló kísérletként a MOX kritikus mérések jönnek szóba. Sajnos ezek közül a nyilvánosan elérhető összetétele erősen különbözik a kiégett fűtőelem összetételétől. Ezért érzékenység számításokon alapuló statisztikai módszerekkel megvizsgálták, hogy az “International Handbook of Criticality Safety Benchmark Experiments” adatbázisból kiválasztott MOX kísérletek alkalmasak-e arra, hogy felhasználásukkal meghatározzák a fentiek szerinti számítási hibát. Sajnos az az eredmény adódott, hogy kiégett fűtőelemekre a fent említett MOX kísérletek információtartalma csak csekély mértékben képes csökkenteni a magadatok bizonytalanságából adódó hibát.

A bizonytalanságok, vagy éppen a túlzott konzervativizmusok egyik forrása az a jelenlegi helyzet, hogy a különböző diszciplínák (reaktorfizika, termo-hidraulika, termo-mechanika) az egyes modellekben nem állnak megfelelő kölcsönös kapcsolatban egymással. Ezt a kérdést az u.n. „multi-physics” modellezés segítségével vizsgálták. A „multi-physics” modellezés keretében létrehozták a FRAPTRAN termo-mechanikai és a TRABCO termo-hidraulikai kódok on-line csatolását. Egy áttekintő tanulmány keretében felvázolták azt a kódrendszert, amely a reaktorfizikai, a termo-hidraulikai és a termo-mechanikai folyamatok on-line csatolásán alapul, és alkalmas a reaktivitás üzemzavarok forrócsatorna számításainak metodikai vizsgálatára, a rés hővezetéssel és a hűtőközeg keveredésével kapcsolatos konzervativizmusok megalapozott csökkentésére.

A negyedik generációs reaktorokkal kapcsolatos kutatásokat a Nemzeti Kutatási és Technológiai Hivatal által finanszírozott NUKENERG projekt és a nemzetközi HPLWR Phase 2 projekt keretében végezték. Az egyik kitűzött cél a szuperkritikus nyomású vízűtéses reaktor (Supercritical Water-Cooled Reactor, SCWR) európai változatának, a HPLWR reaktornak (High Performance Light Water Reactor) olyan stacionárius kapcsolt reaktorfizikai-termohidraulikai programrendszerének létrehozása volt, amely alkalmas a legújabb koncepció zónatervezési számítására. Az erős heterogenitásokat mutató zónakonfiguráció miatt a programrendszer reaktorfizikai elemének tesztelésére nagy számítógépi erőforrást igénylő, fűtőelempálcánkénti teljesítményeloszlásokat is kiértékelő Monte Carlo számításokat végeztek. Mind a sokszorozási tényező, mind a teljesítményeloszlás esetén jó egyezést találtak. A kapcsolt neutronfizikai-termohidraulikai programrendszerrel megtervezték a HPLWR reaktor egyensúlyi zónájának betöltését olyan kezdeti dúsítású kazettákkal is, amelyekkel elérhető a korszerű nyomott-vizes reaktorokra jellemző magas kiégési szint. Továbbá, a NUKENERG projektben elkészítették a KIKO3DMG multigroup nodális program visszacsatolásokkal, kiégéssel és átrakással kiegészített változatát, amely így alkalmas a féműtésű gyorsspektrumú reaktorok zónatervezésére.

A Paksi Atomerőmű zónatervezési számítására az AEKI-ben kifejlesztett KARATE kódrendszert további validációs számításokkal tesztelték. Mindezt az utóbbi időben bevezetett fűtőelem-módosítások, valamint az ezzel kapcsolatos új átrakási sémák indokolták.

Tovább folytatódott a Paksi Atomerőmű aktivitásterjedésének modellezésére alkalmazható kódrendszer fejlesztése (HERMAKT: hermetikus tér, LOCAREL: az erőmű további helyiségei, SINAC: környezet)

Termohidraulikai kutatások (1 kutató)

A Paksi Atomerőmű megrendelésére folytatódott a CERES (Cooling Effectiveness on Reactor External Surface) berendezésen a kísérleti munka. Mivel a hőfluxus-eloszlások számítása igen nagy bizonytalanságot tartalmaz, ezért a PA Zrt. és NUBIKI szakembereivel egyeztetve további három, különböző profil esetén kvázi-stacioner lépésenként emelve a tartályfal hőterhelését, folytatódtak a mérések a hűthetőség megszakadásáig. Megállapítható volt, hogy a kísérletek tanúsága szerint még a szűkített geometriai kialakítás mellett is, ahol az áramlási csatorna kritikus helyein a csatorna szélessége csak 10 mm volt, az ASTEC kód által számított felületi hőteljesítményt 20%-al növelve a reaktortartály külső hűtése a kidolgozott technológiával, 86 C°-os zompvíz esetén is biztosítható volt. A falhőmérsékletek viselkedésének változása a kritikus résben azt mutatta, hogy további csekély résméret csökkenés is jelentősen növelheti ezeket a hőmérsékleteket. A kilépő hidraulikai ellenállás

hatását vizsgálva további kb. 15%-os keresztmetszet csökkenés valószínűleg nem jelentené a hűtés hatékonyságának elvesztését, mert legfeljebb 5 -10 mbar ellenállás növekedést okozna.

A Paksi Atomerőmű 2009. évben üzembe helyezett néhány gadolíniumos tesztkazettát, ezért ezekre a kazettákra a tervezett teljesítmény eloszlások alapján, FLUENT számításokkal meg kellett határozni a várható kazetta kilépő hőmérsékletet és az egyes szubcsatornák kilépő hőmérsékleteit. A számítások a zónatervezés adatai alapján elvégezhetőek voltak. A kísérleti validációs folyamat nyitott kérdése volt a középső rúd-pozíció szerepének vizsgálata a kazetta kilépő termopár által mért hőmérséklet értékének kialakulására. A tisztázandó kérdés volt továbbá a centrális csőben kialakuló áramlás nagysága, ezért a meglévő kazetta modellen sebesség- és hőmérsékletméréseket kellett végezni ledugózott és nyitott centrális csővel. A mérések és számítások összevetéséből megállapítható volt, hogy a kísérleti modellben a lézeroptikai mérések révén megfigyelt intenzív keveredés miatt a központi csőben létrehozott áramlás hatása a sebesség- és hőmérsékletmezőkben csak szélsőséges, tehát az erőművi üzemi értékektől jelentősen eltérő térfogatáramok és hőmérsékletek esetén volt kimutatható. A mérésekben a folyamat kimutatása érdekében a jelentősebb egyenlőtlenlégek miatt a keveredés erősebb volt, ezért meg lehetett állapítani, hogy az irodalomban található számítások túlbecsülik a központi csőben levő áramlás hatását a kazetta kilépő átlaghőmérsékletére az erőművi üzemi esetekben.

Egy a Paksi Atomerőműre korábban végzett elemzés szerint az E3 üzemállapotban fellépő gőzvezeték törés kedvezőtlenebbnek bizonyult, mintha az meleg tartalékban következik be. Ennek következtében meg kellett vizsgálni a főgőzkollektor törés esetét is E3 üzemállapotból kiindulva. A számítások azt mutatták, hogy a főgőzkollektor és a gőzvezeték törés esetek eredményei – súlyosságuk vonatkozásában – alig különböznek egymástól attól függetlenül, hogy az előbbi során az üzemben maradó három FKSZ a sérült hurok áramlási irányának megfordulását eredményezi, míg a gőzvezeték törésnél az összes FKSZ leáll. Emiatt a zónabeli hűtőközeg-felmelegedés mértéke is különbözik a két esetben. Sem a zóna belépő hőmérsékletek, sem a teljesítményre jövetel mértéke nem mutat jelentős eltérést a kétfajta üzemzavar során. Bebizonyosodott, hogy a főgőzkollektor törést követően sem kerül sor nagynyomású ZÜHR betáplálásra.

A Nukleáris Biztonsági Szabályzat új változata előírja a tervezésen túli üzemzavarok értékelését is. Első lépésként el kellett dönteni, hogy a rendelkezésre álló determinisztikus és valószínűségi elemzések elegendőek-e a feladat teljesítéséhez, majd össze kellett állítani a pótlólagosan elvégzendő üzemzavar elemzések listáját. Ennek alapján utólagos elemzések készültek a teljes tápvízvesztés, a ZÜHR teljes elvesztésének, az ellenőrizetlen bórhigulás egy speciális esetének vizsgálatára. Az eredmények bizonyítják, hogy a vizsgált események során a radioaktív kibocsátás nem haladja meg az EU-ban elfogadott kritériumokat.

Az *OECD PKL-2 projektben* Magyarország nem csupán tagországgént, hanem PMK kísérletek végzésével vesz részt: 2010-ben a három kísérletből álló második kísérlet-sorozat végrehajtására került sor. A kísérletek a blokk lehűtése közben fellépő kisméretű primerköri folyás következményeit vizsgálta, különös tekintettel az üzemzavar során a gőzfejlesztőben felgyülemelő nem-kondenzálódó gázok hatására. Az eredmények bizonyították, hogy a szekunderköri nyomáscsökkentés hatékonysága jóval kisebb a nem-kondenzálódó gázok jelenlétében, ami egyben magasabb fűtőelem-hőmérsékletekre vezet. A kísérletek fontos adatokat szolgáltattak a számítógépes programok validálásához.

Fűtőelem kutatások (3 kutató)

Megkezdődött a paksi atomerőmű részére az új technológiával gyártott cirkónium burkolat magas hőmérsékletű vizsgálata. Az első mérések szerint az új E110G burkolat – az eddig használt E110 burkolattól eltérően – nem hasad fel az oxidréteg, hanem a mintákon létrejövő oxidréteg minden esetben kompakt maradt. Az új típusú E110G burkolat magas hőmérsékletű tiszta vízgőzös és hidrogéndús vízgőzös oxidációjának mértéke alapvetően nem mutat eltérést az E110 burkolathoz képest, eltekintve azoktól a hőmérsékletektől, ahol az E110 felhasad. A két ötvözet fázisátmeneti tartománya gyakorlatilag megegyezik. Az új ötvözetből készült burkolat valamivel magasabb nyomáson hasad fel, mint a régi.

Az intézet szakemberei részt vettek a FUMEX-III nemzetközi fűtőelem kódvalidációs együttműködésben és sikeresen alkalmazták az intézetben kifejlesztett FUROM kódot egy nagy kiégésig folytatott, lyukas PWR tablettákkal végzett kísérlet utószámítására.

A Paksi Atomerőmű 4. blokki pihentető medencéjében tárolt szivárgó kazetta vizsgálatára az erőműben részletes mérési programot hajtottak végre. A mért adatok kiértékelésével és a végbement folyamatok numerikus modellezésével az intézet szakemberei rámutattak, hogy a szivárgó kazettaból történő aktivitás-kikerülés nagyon kis mértékű a nedves tárolás körülményei között. A pihentető medencében tárolt egy darab szivárgó fűtőelem-pálcából kb. 50 év alatt távozna annyi aktivitás, amennyi a PM üzemzavari aktivitás-koncentráció korlát eléréséhez szükséges.

A kiegészítő üzemanyag újrahasznosításának modellezésére egy számítógépes programot fejlesztenek ki, amellyel szimulálni lehet a jelenleg még fejlesztés alatt álló gyorsreaktorokat és fejlett újrefeldolgozási technológiákat. 2010-ben elkészült a SITONG4 program rendszerterve és néhány modulja. A programmal egy európai méretű reaktorpark is modellezhető lesz több évtizedes, illetve évszázados távlatban.

Az intézet szakemberei becslést készítettek a paksi atomerőmű leszerelési hulladékainak mennyiségére és összetételére. Az előzetes számítások alapján elmondható, hogy a tartály zónához közeli szegmense ugyan erősen felaktiválódik, de a képződő radioaktív izotópok többsége rövid felezési idejű. A felaktiválódott reaktor szerkezeti elemeket tíz év pihentetés után a hőtermelés szempontjából nem kell nagyaktivitású hulladéknak tekinteni. A felaktiválódott szerkezeti elemek hosszú ideig aktívak maradnak a ⁹³Mo (4000 év) és ⁵⁹Ni (76 000 év) izotópok jelenléte miatt.

Operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése (2 kutató)

A Paksi Atomerőmű már néhány éve készül az 1-4. blokk hagyományos irányítástechnikai rendszereinek felújítására (a biztonsági I&C rendszerek felújítása már kb. 10 éve sikeresen megtörtént). A rekonstrukciót előkészítő munka egyik fontos lépéseként 2010-ben elkezdődött a vezénylők és az ember-gép kapcsolati felület modernizálásának megalapozása. Ezzel összefüggésben az MTA KFKI Atomenergiakutató Intézet megbízást kapott arra, hogy végezze el az erőmű jelenlegi kezelői felületeinek értékelését és készítsen koncepciót a vezénylők és az ember-gép kapcsolat átalakítására. A megbízást a PA Zrt. Folyamatirányítási Rekonstrukciót Előkészítő Kiemelt Projekt (FIREKP) adta, a munkában az ETV Erőterv Zrt. alvállalkozóként működött közre. A munka során az alábbi vezénylőkkel foglalkoztak: blokkvezénylő, tartalékvezénylő, közösüzemi vezénylő és erőművi irányító központ.

A munka eredményeképpen 2010 végére elkészült a „Korszerű ember-gép kapcsolati felület kialakítása a Paksi Atomerőműben” című Konceptióterv, amely az elemzések, felhasználói és szakértői értékelések, továbbá a mai nemzetközi gyakorlat alapján javaslatokat és ajánlásokat fogalmaz meg a vezénylők átalakítására. A Konceptióterv az átalakításra három eltérő javaslatot ír le: két ún. hibrid (analóg és digitális eszközöket egyaránt alkalmazó) verziót és egy ún. digitális (teljesen számítógépesített) változatot.

A nemzetközi tapasztalatok szerint a szimulátorok alkalmazása elengedhetetlen egy nagy I&C átalakítás sikeréhez. A szimulátorok különféle verziói hatékonyan képesek támogatni a tervezési, tesztelési és oktatási-képzési feladatok sikeres végrehajtását. A Konceptióterv ezzel összefüggésben a paksi oktatószimulátor átalakítását javasolja. Először létre kell hozni egy olyan szimulátor konfigurációt, amely az I&C koncepcionális tervezési fázisában támogatja a tervezést végző szakemberek munkáját. Ezzel párhuzamosan el kell kezdeni új alapokon egy új szimulátor kialakítását úgy, hogy a jelenlegi szimulációs rendszer alapvető modelljeit az új hardver-, alapszoftver- és szimulációs-eszköz környezetben újra felhasználják.

A fenti tevékenységhez kapcsolódva 2010 második felében elindult egy olyan munka, melynek végső célja az Erőművi Irányító Központ (EIK) új vezénylőjének kialakítása és az EIK jelenlegi sémafalának felújítása. Tervek szerint az új EIK vezénylő és az új sémafal szerelésére és üzembe helyezésére 2012 végéig kerülhet sor.

A Paksi Atomerőmű VERONA zónaellenőrző rendszer rekonstrukciójának 2. fázisa 2010-ben befejeződött. Ma már az összes blokkon és a szimulátor mellett is az a V6.20 verzió működik, amely képes a kiegészítő mérget tartalmazó üzemanyag kazetták kezelésére.

A Paksi Atomerőmű blokkjain 2008 óta működő reaktor zajdiagnosztikai adatgyűjtő rendszer (PAZAR-M) és a kapcsolódó jelfeldolgozó rendszer (PAZAR-K) felhasználásával 2010-ben üzemszerűen folytatódtak a reaktordiagnosztikai mérések és kiértékelések. A nagymennyiségű mérési adatot alapvetően az atomerőművi blokkok állapotának monitorozására használták, de a rendszeresen mért adatok minősége olyan, hogy lehetővé teszi nagy pontosságot igénylő paraméter-becslési eljárások használatát is. Az elmúlt két évben a modellfejlesztési munkák a moderátor hőmérséklet szerinti reaktivitás együtthatójának (az ún. MTC paraméternek) zajdiagnosztikai alapú meghatározására koncentráltak. A fejlesztések során sikerült egy olyan eljárást létrehozni, amely megbízhatóan és kellő pontossággal adja meg az MTC értékét. A 2009-ben végzett előzetes tesztek után 2010-ben egy szisztematikus vizsgálattal minősítették az MTC meghatározási eljárás alkalmazhatóságát. A vizsgálati program során méréseket végeztek a Paksi Atomerőmű 1-4. blokkján, az üzemanyag kampány elejétől a végéig, hogy kellő tapasztalatokra tegyenek szert a módszer pontosságáról és stabilitásáról a reaktorblokk különféle üzemállapotaiban. A vizsgálatok előzetes értékelése azt mutatta, hogy a módszer az eltérő zónatöltetekre is jól működik, és a kampány elejétől a végéig használható az MTC becslésére. A munka 2011-ben is folytatódik, ekkor a cél egy olyan MTC-kiértékelő modul kidolgozása, amely a szabványos PAZAR-K kiértékelő rendszer keretében működik.

Atomerőművi szimulációs kutatások (4 kutató)

2010-ben befejezték a paksi teljesléptékű szimulátor új termohidraulikai és neutronfizikai modelljeinek a tesztelését. Az új rendszeren megkezdődött Pakson az oktatás.

A NURISP Európai Unió projekt keretein belül heterogén forrást modelleztek a rác-Boltzmann módszer segítségével. Numerikus szimulációk sorával igazolták a módszer

pontosságát, és a szimulációs eredményeket felhasználva meghatároztak néhány kulcsfontosságú paraméter között fenálló funkcionális kapcsolatot. Méréseket végeztek az ACRYL kísérleti berendezésen, és gyorskamera segítségével vizuálisan is megfigyelték a kritikus hőfluxus kialakulásához vezető folyamatokat. Diszkrét kinetikus modellek segítségével fallal határolt két- és háromdimenziós turbulenciát vizsgáltak. Új módszert javasoltak a fal közeli régiók modellezésére.

Ún. árnyékolt örvények közötti kölcsönhatásokat vizsgálva bizonyították, hogy a viszkózus régióban ezek az örvények is összeolvadhatnak és e kölcsönhatás eredményeként tripólus alakulhat ki. Megmutatták, hogy ezeket az örvényeket speciális módon perturbálva létrehozhatók azok az egzotikus örvényszerkezetek (szabályos sokszög alakú örvények), melyek közül néhányat korábban kísérletekben is megfigyeltek.

Megmutatták, hogy szuperkritikus nyomású reaktorokban csőtöréses balesetek esetén a hirtelen forrás kialakulása helyett vízútás is felléphet, a reaktor munkapontjától függően. Elméleti határt adtak az ilyen események során bekövetkező maximális nyomásváltozásra.

Sikeresen befejeződött a Paksi Atomerőműbe tervezett új reaktorszabályozó algoritmusának teljes körű tesztelése a teljesléptékű szimulátor segítségével.

Anyagtudományi kutatások (8 kutató)

Megmérték dimetiletilén és dimetilpropilén deuterizált metilalkoholos oldatainak kisszögű neutronsórását és sűrűségét a koncentráció és hőmérséklet függvényében. Az eredményeket összehasonlították dimetiletilén és dimetilpropilén nehézvízes oldatain végzett korábbi mérések eredményeivel, és a különbségeket értelmezték az elegy molekulái közötti kölcsönhatások alapján.

Megadták a Johnson-Nyquist feszültség-zaj egy lehetséges termodinamikai értelmezését és posztulálták hasonló fehér zaj fellépését hőmérsékletben és nyomásban is.

Meghatározták a korróziós termékek ionjainak szerkezeti anyagokat modellező cirkónium és rozsdamentes acél vékonyrétegek felületén bekövetkező adszorpciós-deszorpciós folyamatainak kinetikai paramétereit a kvarckristály mikromérleggel. Vizsgálták a primerköri viszonyoknak megfelelő hidrotermális körülmények között képződő korróziós termék kolloid részecskék stabilitását, meghatározták a részecskék elektromos töltését a pH függvényében. Megállapították, hogy savas közegben a fém kolloidok zéta-potenciálja nulla, a részecskék semlegesek, aggregációra hajlamosak, míg a lúgos tartományban negatívan töltötteké váltak. Megállapították, hogy totálreflexiós röntgenfluoreszcencia analízis segítségével a cirkónium felületű mintákon mérhető a hasadási- és korróziós termékek és az urán felületi akkumulációja, a módszer alkalmas koadzorpció vizsgálatára is. Meghatározták az érzékenységi faktorokat és egyes elemekre. Építettek egy kombinált elektrokémiai-nyomjelzéses mérőrendszert, mely tiszta β -sugárzó nuklidok adszorpciójának követésére alkalmas. Eredményeik hozzájárulnak a szerkezeti anyagok felületein lévő aktív/inaktív anyagok mennyiségi becslésében, mely a kiégett fűtőelemek későbbi kezelése során fontos lehet.

Reaktorgáz mintákban, elsősorban a ^{41}Ar és ^{135}Xe nuklidok aktivitás-koncentrációit mérték a reaktor szellőzőrendszerének ellenőrzése, a normál üzemi viszonyokra jellemző kibocsátások monitorozása céljából. Műszeres neutron-aktivációs analitikai (INAA) módszerrel

meghatározták a Cl, Br, I, Na, K, Ca, Mg, Ba, Al, Fe, Cr, Mn, Cu és Co koncentrációit a primer- és szekunderköri hűtőközegben, a vízelőkészítő, a pótvíz és a belső fűtőköteg tároló medencék vízmintáiban.

Kidolgozták egy kombinált, in-situ elektrokémiai nyomjelzéses mikromérleges mérési eljárást. A módszer lehetővé teszi béta-sugárzó nuklidok (pl. ^{36}Cl) adszorpciós kinetikájának részletes megismerését.

Magas hőmérsékletű alkalmazásokhoz fejlesztett acéltípusok vizsgálatát kezdték meg neutronfizikai módszerekkel és mechanikai vizsgálatokkal. Kutatták a kisszögű neutronszórás és a magas hőmérsékletű szakítóvizsgálatok eredményei között fennálló korrelációt.

Sugárvédelmi és környezetfizikai kutatások (14 kutató)

A Nemzetközi Űrállomás (ISS) orosz modulján található *Pille-MKSz* dózismérő rendszer, amely része az ISS dozimetriai szolgálati rendszerének, az AEKI-ben lett kifejlesztve. Segítségével 2003 óta folyamatosan végeznek méréseket dóziseloszlás feltérképezésére. A rendszerrel az űrhajósok személyi dózisát mérik űrséták alatt és rendkívüli naptevékenység idején. A korábbi évekhez hasonlóan a több ezer mérés eredményét 2010-ben is feldolgozták, valamint nemzetközi konferenciákon és folyóiratokban publikálták. Sor került a Charles Simonyi által visszahozott két lecsökkent érzékenységgű dózismérő részletes vizsgálatára is.

A *Pille* tapasztalatai alapján az AEKI-ben kifejlesztett földi, kereskedelmi célú *PorTL* rendszert az AEMI Atomenergia Mérnökiroda Kft. sikeresen hasznosítja. Az AEKI-ben 2010-ben is folytatódott a *PorTL* továbbfejlesztése, elsősorban a LiF TL tabletták ragasztási technológiájával, illetve a dózismérő blokkok gyártásával kapcsolatosan.

Elkészült a 4π térszögben közel egyenletes érzékenységgel rendelkező háromtengelyű szilícium detektoros űrdozimetriai teleszkóp (*TriTel*) mérnöki-minősítő modellje, melyen megkezdődtek az első tesztek. Elkészült a műszer űrhajós gyakorló példánya is, amely az asztronauták kiképzését fogja segíteni. A készülék az elnyelt dózis mellett a LET (lineáris energiaátadási tényező) és a sugárzási minőségi tényező meghatározására is alkalmas, így számítható lesz a sugárzás biológiai hatásával összefüggésben álló dózisegyenérték. A *TriTel* különböző változatai a Nemzetközi Űrállomás európai modulján és orosz szegmensén, valamint egy műhold fedélzetén fognak méréseket végezni.

Az ESA *Rosetta* űrszondája 2014-ben éri el a Csurjumov-Geraszimenko üstököst. Az AEKI közreműködésével két műszer is készült (a *ROMAP/SPM* plazma- és a *SESAME/DIM* pordetektor) az űrszonda leszálló egységéhez. 2010-ben folytatódott a műszerek repülés alatti ellenőrzésére és a teszt-adatok kiértékelése. Folytatták továbbá a későbbi tesztek és a leszállási program előkészítését, valamint a mérőműszerek földi kalibrálását.

A Nemzetközi Űrállomás kozmikus sugárzási viszonyainak felmérése, az Orosz Tudományos Akadémia Orvosbiológiai Problémák Intézetével (RAS IBMP) együttműködésben a továbbfejlesztett eszközök alkalmazásával folytatódott, melyeket orosz Progressz típusú teherűrhajók juttattak a fedélzetre. Ugyancsak 2010-ben új feladatként jelentkezett a kozmikus sugárzás mélységi eloszlásának biológiai objektumokban történő meghatározása, szintén az IBMP-vel együttműködésben.

Az ESA és a Japán Űrkutatási Ügynökség (JAXA) által szervezett Matroshka-2B-KIBO program keretében az űrhajósokat ért egészsztest-, illetve az egyes szerveiket ért sugárdózis meghatározása volt a cél. Ez a munka jelenleg is folyamatban van.

A CFD alapú részecske trajektória modell továbbfejlesztésével megbízhatóan modellezhetővé vált mind a nano-, mind pedig a mikrométer tartományba eső inhalált radioaktív részecskék követése a légzőrendszeren belül.

A továbbfejlesztett CFD alapú modellel folytatták a dózis és biológiai hatás közötti összefüggések tanulmányozását a kis dózisok tartományába. A kutatások rámutattak többek között arra, hogy a sejtek közötti kommunikációnak elsődleges szerepe lehet a biológiai válasz szempontjából.

Az újonnan kifejlesztett időfüggő hámszövet modellel végzett szimulációk alapján az ionizáló sugárzás jelentősen befolyásolja a hámsejtek koreloszlását, melynek a karcinogenezis szempontjából kulcsszerepe lehet.

A villamos energia ellátásbiztonságát garantáló új erőművek primer energiaforrás szerinti megoszlására öt forgatókönyvet értékelték, teljes társadalmi költség és többszempontú döntési modellek felhasználásával. Legkedvezőbbnek a magas atomenergia hányaddal rendelkező forgatókönyv adódott, másodikként pedig a megújuló energiaforrásokra építő scenárió került ki, bár mindkét forgatókönyv jelentős energiatároló kapacitást igényel.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének fő eredményei (0 kutató)

A Budapest Kutatóreaktor Műszerközpont (BKM) feladata, hogy biztosítsa a Budapesti Kutatóreaktor berendezéseinek hatékony kihasználást az alap és alkalmazott kutatások területén. Ennek érdekében a BKM évek óta működtet egy nemzetközi „user” programot, amelynek keretében hazai és nemzetközi tudósok pályázhatnak mérési időre. Miután a BKM partnere az Európai Közösség által támogatott NMI3 – The Integrated Infrastructure Initiative for Neutron and Muon Spectroscopy - konzorciumnak, így az európai kutatók a mérési idő mellett utazási támogatásra is pályázhatnak. BKM-hez évente kétszer lehet kutatási pályázatot beküldeni; májusban, ill. októberben. A pályázati űrlap letölthető a BNC.hu honlapról ill. online is beküldhető. A pályázatokat egy nemzetközi bíráló bizottság értékeli és rangsorolja. 2010-ben a bizottságnak új elnöke van (Stuttgart, Németország). A rendkívül nagy mérési idő igény miatt, a BKM csak kiváló és nagyon jó pályázatok számára tud mérési időt biztosítani.

Az NMI3-FP7 program 2009 februárjában kezdődött és 2010 decemberében fejeződött be. A két éves program alatt 155 reaktornapot bocsátottunk az európai kutatók rendelkezésére, ezzel 22 projekt megvalósulását segítettük elő. 27 kutató közül 22-nek fedeztük az utazási és szállás költségét. BKM-nek rendkívül fontos regionális szerepe van, a kutatók fele érkezett a közép-kelet-európai régióból.

2010. május végén került megrendezésre a 10. Central European Training School on Neutron Scattering - Közép-európai neutron-szórásos iskola. A programnak 30 résztvevője volt, legtöbben a közép-európai régióból érkeztek, de volt résztvevő Oroszországból, Németországból, sőt még Kínából is. A program nagyon sikeresnek bizonyult, nagyon érdeklődő fiatal csapat jött össze.

2010 novemberében a Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testület (ISAC) és a Pályázati Bíráló Bizottság (USP) üléséhez kapcsolódóan „user meeting”-t szerveztünk, ahol a külföldi kutatók a BKM berendezésein végzett kutatásaikról számoltak be. A programot az tanácsadó testületek tagjai olyan színvonalasnak és jónak ítélték, hogy javasolták annak évenkénti megrendezését.

2008-ban alakult a Budapesti Kutatóreaktor kezdeményezésére a kelet-európai reaktorok koalíciója; East European Research Reactor Initiative. Az elmúlt évben együttműködés az oktatás-tréning, az izotópgyártás, a reaktor nagyberendezéseinek kihasználtsága, és az anyagvizsgálat-besugárzás területén valósul meg.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet tevékenységéről és eredményeiről időközönként internetes hírportálokon, napilapokban, valamint rádió- és televízió műsorokban számol be.

A teljesség igénye nélkül megemlíthetjük, hogy 2010 áprilisában a nagy érdeklődésre számot tartó vulkáni hamu ügyében szerepelt az intézet véleménye a Kossuth Rádióban, az űrkutatási eredményekről (TRITEL-SURE) beszámolt a Magyar Nemzet, számtalan internetes hírportálon jelentek meg beszámolók az intézet eredményeiről és az intézet kutatóinak véleményét kérték több kérdésben. Mind az írott sajtó (Népszabadság, Magyar Nemzet, HVG, stb.) mind a rádió és televízió riporterei gyakran keresik meg az intézet vezetőit közérdekű kérdésekkel a Paksi Atomerőmű biztonságával, működésével, jövőjével valamint az atomnergetika általános kérdéseivel kapcsolatban. Több esetben sikerült elosztatni félreértéseket és megelőzni azt, hogy feleslegesen kerüljön alaptalan ijesztő hír a médiába.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

2010 nyarán megalakult a magyar Fenntartható Atomenergia Technológiai Platform. A platformot a magyar atomenergetika igényeinek kielégítésére hozták létre, ám figyelembe vették a nemzetközi trendeket is. A platform céljai megfelelnek az intézet kutatási célkitűzéseinek és a nukleáris ipar jelenlegi igényeit is kielégítik valamint a jövő céljait is szolgálják. A magyar atomerőmű meglévő blokkjaival kapcsolatos k+f igények kielégítése fontos, de csökkenő jelentőségű. A platform legfontosabb rövidtávú célja az új atomerőművi blokkok kiválasztásának valamint az e blokkok építéséhez és üzemeltetéséhez kapcsolódó tevékenységek támogatása. Hosszútávon a platform legfontosabb célja a magyarországi gyorsreaktoros kutatások elősegítése, mert a gyorsreaktorok segítségével mind a fűtőelemciklus zárása mind a radioaktív hulladékok mennyiségének csökkentése megoldható.

Az intézet 2010 során együttműködési megállapodást írt alá egy cseh és egy szlovák kutatóintézettel az ALLEGRO berendezés tervezésének és építésének előkészítése céljából. Az ALLEGRO a gázhűtéses gyorsreaktorok demonstrátora lesz. Azt, hogy az ALLEGRO a három ország közül melyikben épül fel később döntik el.

Az intézet kutatói mind az Eötvös Loránd Tudományegyetemen, mind pedig a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen aktívan résztvesznek mind az alapoktatásban mind pedig a posztgraduális képzésben. Az ELTE-n az AEKI kutatói a vegyészet, ezen belül

a fizikai kémia oktatásában tevékenykednek, a BME-n pedig a nukleáris technika, ezen belül elsősorban a reaktorfizika területén.

Nemzetközi kapcsolataik fontos részét képezi az EU projektekben való részvétel, kiterjedt kapcsolataik vannak számos kutatóintézetrel és egyetemmel, elsősorban Európában, de a tengerentúlon is.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A hazai pályázatok közül a legfontosabb az intézet jövője szempontjából a NUKENERG, amely kétszer három évre biztosítja a perspektivikus energiatermelési mód (negyedik generációs atomerőművek, fúzió) kutatásának lehetőségét. Sajnos az NKTH jelenleg felfüggesztette a finanszírozást a már teljesített munkák tekintetében is.

Az elnyert nemzetközi pályázatok jórésze az EU keretprogramjaiból származik és ezek jelentősége abban áll, hogy a korszerű atomenergetikához kapcsolódó nemzetközi kutatásokhoz biztosít kapcsolatot, lehetőséget adva részben a hasadáson alapuló atomreaktorok korszerű változatainak vizsgálatára részben a fúzióval kapcsolatos kutatásokra. E két látszólag távoli területet az új, magas hőmérsékleten is használható szerkezeti anyagok kutatása kapcsolja össze.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Maráczy Cs, Keresztúri A, Trosztel I, Hegyi Gy: Safety analysis of reactivity initiated accidents in a HPLWR reactor by the coupled ATHLET-KIKO3D code. Progress in Nuclear Energy, 5236 (2): 191-196 (2010)
2. Keresztúri A, Hegyi Gy, Korpás L, Maráczy Cs, Makai M, Telbisz M: General features and validation of the recent KARATE-440 code system. Int. J. Nuclear Energy Science and Technology, 10.1504/IJNEST.2010.033476, 5 (3): 208-238 (2010)
3. Barna IF, Imre AR, Baranyai G, Ézsöl Gy: Experimental and theoretical study of steam condensation induced water hammer phenomena. Nuclear Engineering and Design, 240: 146 (2010)
4. Hózer Z, Balaskó M, Horváth M, Kunstár M, Matus L, Nagy I, Novotny T, Perez-Feró E, Pintér A, Vér N, Vimi A, Windberg P: Quenching of high temperature VVER fuel after long term oxidation in hydrogen rich steam. Annals of Nuclear Energy 37, 71–82 (2010)
5. Kiss S, Lipcsei S, Végh J: Monitoring MTC using cold leg thermocouple and background neutron detector noise signals in a VVER-440 reactor during a whole fuel cycle. Annals of Nuclear Energy 37, 827-834 (2010)
6. Végh J, Kiss S, Lipcsei S, Horváth Cs, Pós I, Kiss G: Implementation of New Reactivity Measurement System and New Reactor Noise Analysis Equipment in a VVER-440 Nuclear Power Plant. IEEE Transactions on Nuclear Science, 57(5): (2010)
7. Barna I F, Imre A R, Baranyai G and Ézsöl G: Experimental and theoretical study of steam condensation induced water hammer phenomena. Nuclear Engineering and Design, 240: 146-150 (2010).
8. Házi G, Tóth G: Lattice Boltzmann simulation of two-dimensional wall bounded turbulent flow. International Journal of Modern Physics C, 21(5): 669-680 (2010)

9. Imre A R, Házi G, Horváth Á, Maráczy Cs, Mazur V, Artemenko S: The effect of low-concentration inorganic materials on the behaviour of supercritical water. Nuclear Engineering and Design, (2010)
10. Ryzhov S B, Mokhov V A, Nikitenko M P, Bessalov G G, Podshibyakin A K, Anufriev D A, Gadó J, Rohde U: VVER-Type Reactors of Russian Design. Handbook of Nuclear Engineering, Springer, ISBN 978-0-387-98130-7 (2010)
11. Osán J, Meirer F, Groma V, Török S, Ingerle D: Strelci C and Pepponi G Speciation of copper and zinc in size-fractionated atmospheric particulate matter using TXRF-XANES. Spectrochimica Acta, Part B, 65: 1008–1013 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: KFKI Atomenergia Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	188	Ebből kutató ² :	38
PhD, kandidátus:	28	MTA doktora:	4
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			10

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			115
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			101
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	11	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 41
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 21
Könyv ⁸	magyarul:	2	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	6	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	76,24	Összes független hivatkozás száma:	95
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	104		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			79
		posztterek száma:	20
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	4		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	6	PhD:	7

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		643,62	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	5	Teljes saját bevétel:	1007,7 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	1,31	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			4
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	13,0 MFt
ÚMFT témák száma:	3	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			16
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	27,96	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			24
EU forrásból:	13	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	91,52 MFt
Egyéb:	11	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	108,24 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		728,59	MFt

KFKI RÉSZECSCKE- ÉS MAGFIZIKAI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest Konkoly-Thege Miklós út 29-33., 1525 Budapest Pf. 49.

telefon: 1-392 2512; fax: 1-392 2598

e-mail: sznagy@rmki.kfki.hu; honlap: www.rmki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az MTA KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet alapító okiratában rögzített feladatainak, valamint az MTA közfeladatainak ellátásából ráháruló teendőknél megfélelve eredményes kísérleti és elméleti felfedező kutatást 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, fúziós plazmadiagnosztika, űrtechnika, nagy sebességű adatfeldolgozás, egyes spektroszkópiák, speciális igényeket kiszolgáló elektronikai, mechanikai és információ-technológiai eszközök, valamint szoftverek létrehozása és fejlesztése. A Magyar Euratom Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálta a szabályozott magfúziós energiatermelés megvalósításához hozzájáruló magyar kutatás-fejlesztési tevékenységet. Működtette és fejlesztette nagyberendezéseit, az EG-2R gyorsítót, a hozzá kapcsolt NIK nehézion-implantert, az MBE molekulanyaláb-epitaxia berendezést, a GINA neutronreflektométert, a kutatást kiszolgáló GRID rendszerű és más nagykapacitású számítógépeit. Működtette és fejlesztette a KFKI Telephely számítástechnikai hálózatát, fejlesztette az ennek biztonságát növelő eszközöket, és ellátta a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Program regionális központi feladatait is.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion-fizika

A CERN nagy hadron ütköztetője, az LHC, 2010-ben elérte a 7 TeV rekordnagyságú energiát. Az ütközési hozam 5 nagyságrenddel nőtt (50 pb-1 proton-proton (p+p) ütközés 7 TeV, és 80 millió Pb+Pb nehézion-ütközés 2,76 ATeV energián) és elkezdődött a fizikai eredmények folyamatos publikálása. Az LHC ALICE, ATLAS, CMS, TOTEM, valamint az ASACUSA, NA61, FOPI, CBM és a PHENIX nemzetközi részecske- és magfizikai kísérletekben dolgozó magyar csoportokat RMKI-s kutató koordinálja.

A magyar CMS-csoport fő feladata a kísérlet működésének és az adatgyűjtés zavartalanságának biztosítása volt. A csoport által épített és üzemeltetett barrel-müon-detektor pozíció-monitorozó programja végig hibátlanul működött, elkészítettek és üzembe állítottak egy, a korábnál sokkal pontosabb algoritmussal működő szoftvert. Az RMKI kutatóinak döntő szerepe volt az első 7 TeV-es p+p ütközésekben mért részecskeeloszlások meghatározásában. Munkájuk eredményeképpen a rekord 7 TeV energián a CMS publikálta az első cikket. A kapott eredmények összhangban vannak a 0,9 TeV-en végzett korábbi mérésekkel és megerősítik, hogy a proton-antiproton és a proton-proton ütközésekben közel azonos mennyiségű hadron keletkezik. A 2,36 és 7 TeV-en kapott hadronsűrűség a modellek által jósoltnál meredekebb energiafüggésre utal. Az eredményes munka elismeréseképpen az együttműködés a CMS kvantumszindinamikai (QCD) kutatócsoportjának vezetőjéül az RMKI munkatársát választotta meg.

A magyar ALICE csoport a HMPID aldetektor üzemeltetéséért felelős. A 7 TeV-es p+p adatokban HMPID-specifikusan analizálták a két- és három-jet eseményeket, vizsgálták a kvark és gluon jetek közötti eltéréseket. Az eredményeket felhasználták a nehézion-kísérletekben 2,76 ATeV-nél mért részecskeszám elnyomás vizsgálatánál. A magyar csoport az új VHMPID aldetektor fejlesztése során megépítette és a CERN PS gyorsító nyalábjánál tesztelte a trigger rendszer és a Cserenkov-modul tükörrendszerének újabb prototípusát.

Az ATLAS kísérletben az RMKI kutatói a Liquid Argon csoport tagjaként, francia kutatókkal együttműködve a 7 TeV-es p+p ütközésekben megjelenő izolált elektronok által keltett elektromágneses záporok térbeli alakját és energiaeloszlását vizsgálták. Bebizonyították, hogy az elektromágneses kaloriméter záróegységek abszorbens-szerkezetének pontos ismeretében csökkenthető a mérések és a szimulációk eredményei közötti eltérések.

A TOTEM kísérletben a p+p szórás diffrakciós vizsgálatával a proton belső szerkezetét kutadják. A TOTEM kísérletnek 7 TeV energián sikerült megfigyelnie a diffraktív p+p szórást és az első dupla-Pomeron csere folyamatát. Az RMKI kutatói jelentős szerepet játszottak a detektorrendszer vezérlését végző Detector Control System (DSC) véglegesítésében, és beépítették a biztonságos működést támogató totAlarm riasztási rendszert.

Az SPS NA61/SHINE kísérletben az adatgyűjtő rendszer teljesen magyar tervezésű és gyártású, ezért a hardver és a szoftver folyamatos fejlesztése is magyar feladat. 2010-ben 20-160 GeV energiájú protonokból és pionokból álló nyalábbal bombáztak szén és cseppfolyós-hidrogén céltárgyat, és sikerült megszerezni a begyűjtött adatok mennyiségét.

A CERN antiproton-lassítójánál tovább pontosították az anyag-antianyag szimmetriáját kimondó CPT-invariancia kísérleti ellenőrzését. Az RMKI részvétellel épített kétmódusú Paul-csapdában továbbfejlesztették az antiproton-annihiláció monitorozását.

Az amerikai BNL RHIC gyorsító PHENIX kísérletében az RMKI kutatóinak részvételével elsőként sikerült arany-arany ütközésekben meghatározni a kvark-gluon plazmából kiszabaduló termikus gamma-fotonok eloszlását és megmérni a létrejövő kvarkfolyadék hőmérsékletét, amely legalább 4 terakelvinnek (300 MeV-nek) adódott. A direkt foton színekép megmérése során kapott érték azt jelenti, hogy RHIC energián az Au+Au ütközésekben megjelenik a kvark-gluon plazma. Az eredményekhez a magyar PHENIX csoport a fotonok repülési időmérésének kalibrációjával járult hozzá.

A CERN RD51 keretében, az RMKI és az ELTE együttműködésében a REGARD csoport új típusú gáزدetektorokat fejleszt. Így prototípusokat készítettek az ALICE VHMPID trigger és az NA61/SHINE centralitásmérő detektorokhoz, valamint megépítettek egy több kamrából álló müon-tomográfot barlangok feltérképezésére, amit sikeresen ki is próbáltak.

Az RMKI Detektorépítő csoportja az ALICE és az NA61 kísérletek számára továbbfejlesztette a Detektor Data Link (DDL) hálózati kártyát. Kifejlesztették a DDL kártyák kiolvasásához szükséges RORC (Read-out Receiver Card) kártyák PCI Express alapú változatát. Részt vettek az RMKI Plazmafizikai Főosztályának EDICAM fejlesztésében, az áramköröket tervező alvállalkozó számára specifikálták a gyártásfejlesztés irányait.

Az RMKI kutatócsoportja 2009-ben csatlakozott a gravitációs hullámok észlelésére Olaszországban épített VIRGO kísérlethez. Kidolgozták a VIRGO és LIGO kísérletek számítástechnikai infrastruktúrájának összehangolását, a már működő GRID alapú adatgyűjtő rendszerbe GPU-egységeket építettek be.

Anyagtudomány kísérleti magfizikai módszerekkel

Üzemeltették az 5 MV-es EG-2R iongyorsítót, a NIK nehézion-implantert, valamint a molekulanyaláb-epitaxia (MBE) berendezést, amelyek a HIPP konzorcium részei. A BNC konzorcium részeként működtették a GINA polarizált neutron-reflektométert, amelyet főleg mágneses vékonyréteg-vizsgáló berendezésként külső felhasználók is igénybe vesznek. Kutatóik több nagy európai kutatási infrastruktúrát is rendszeresen használnak.

Megvizsgálták LiCoO_2 -ban, a lítiumion-akkumulátorok egy alapvegyületében a Co 1s röntgenabszorpció „előélet”. A megfigyelt anomális spektrumcsúcsot sikerült a szomszédos kobalt ionok közti 4p-3d hibridizációt figyelembe véve, törzsluk közelítéses elmélettel reprodukálni. Az $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ dielektromos függvényét a nagy hullámszámvektorok korábban feltérképezetlen tartományában nemrezonáns rugalmatlan röntgenszórással és elméleti módszerekkel vizsgálva megmutatták, hogy a Ba 5p és az Y 4p törzs-elektronok jelentős hatással vannak a Cu 3d és az O 2p vegyértékgerjesztéseire

Arzénnel implantált szilícium szeletekben Rutherford-visszaszórásos spektrometriával a SPIRIT EU-konzorcium 9 intézetével együttműködve nagy pontossággal (1,2 %) meghatározták az implantált fluenciát. A méréseket két detektorral és két döntési szögnel végezték.

Ionnyalábos analízissel és ellipszometriával meghatározták az impulzuslézeres leválasztással előállított hidrogén tartalmú amorf Si minták összetételét a preparációs hidrogén nyomás függvényében. Megállapították, hogy a hidrogén beépülése az amorf Si rétegbe korlátozott, a hidrogén nyomás növelésével ugyanakkor egyre több oxigén is beépül. A kialakult filmek törésmutató-gradiense az oxigén koncentráció gradiensevel korrelál.

A rezonanciaerősítést is kihasználó polarizált neutronreflektometriával $\text{Ni}_{55}\text{Cu}_{45}/\text{V}$ ferromágnes/szupravezető kettősrétegekben kriptoferromágnesség kialakulására utaló eredményeket kaptak.

Korábbi felfedező kutatási eredményeiket felhasználva ionbesugárzáson alapuló új feszültségmentesítési eljárást dolgoztak ki neutrontükrö-rétegekre, továbbá neutrontükrök és polarizátorok tesztelésére alkalmas különleges mágnesezőket, rádiófrekvenciás flippereket és más eszközöket is kifejlesztettek.

Elméleti jóslatokra támaszkodva kísérletileg igazolták a fotonok mag-rezonanciaszórásában fellépő reciprocitássértést. Az ESRF-ben elvégzett kísérletben megmutatták, hogy a szinkrotronos Mössbauer-időspektrumok alakja alapvetően megváltozhat pusztán azáltal, hogy a mintát egy, a foton nyaláb tengelyére merőleges tengely körül 180° -kal elforgatják.

Az MBE-ben szilícium felületre magas hőmérsékleti tartományban leválasztott Fe és Fe/2Si rétegekben Mössbauer- és elektronspektroszkópiával meghatározták a Fe-Si rendszerek fázisait és fázishatárait.

Pozitron annihilációs spektroszkópiával kimutatták, hogy zeolitok szintéziselegetyből történő előállítása során az LTA és MFI zeolitoknál a kristályos szerkezet kialakulása már azelőtt megkezdődik, hogy azt röntgendiffrakcióval észlelni lehetne. Ez az eredmény fontos lehet katalitikus alkalmazásokban. Ciklodextrinek szabad térfogatát vizsgálva megállapították, hogy a pozitron forrás által okozott sugárzási károsodás már néhány nap alatt irreverzibilis

változásokat okoz, amit biológiai minták esetében feltétlenül figyelembe kell venni. A CHARISMA EU FP7 projekt BNC platformjának részeként az RMKI Van de Graaff gyorsítója elérhetővé vált olyan külföldi kutatók számára, akik kulturális örökséget képező tárgyakat kívánnak roncsolásmentesen vizsgálni. Egy németországi pályázóval együttműködve kihozott nyalábos PIXE mérésekkel lapis lazuli fél-drágaköveket osztályoztak származási helyük szerint.

Elméleti fizika

A kutatók a részecske- és magfizika alap kutatási kérdéseivel, és ezzel összefüggésben kvantumtérelméleti, relativitáselméleti és statisztikus fizikai problémák megoldásával foglalkoznak. Újabban elkezdett interdiszciplináris téma a gravitációs hullámok elméleti és kísérleti kutatása.

A gravitációhoz csatolt tömeges skalármezők közel periódikusan rezgő, a térben jól lokalizált anyagcsomókat alkotnak. Az ilyen objektumokat oszcillatonoknak nevezik. Az oszcillatonokat nem stabilizálja megmaradó töltés és a sugárzási térhez való csatolásuk miatt létezésük már önmagában is meglepő. Az oszcillatonok tömege csökken a skalármező sugárzása miatt, de ez a csökkenés rendkívül lassú, a csökkenés időskálája az univerzum életkorával összemérhető. Aszimptotikusan sík téridőt feltételezve, abban a határesetben, amikor az oszcillatonok központi amplitúdója kicsi, sikerült meghatározni a kimenő skalárhullámok amplitúdóját és ebből az oszcillatonok tömegének időbeli változását. Gravitációsan kötött komplex skalármezők által létrehozott bozon csillagokat és valós mezőkből létrejövő oszcillatonokat vizsgálva inflációs de Sitter-típusú kozmológiai modellekben megmutatták, hogy a tágulás hatására a csillagok tömege lassan csökken. Ha az univerzum tágulása lassú, akkor ez a tömegcsökkenés exponenciálisan lassú lesz.

Nem-ábeli terekben rövid ideig tartó, nagyon intenzív chromo-elektromos térerősség kialakulása esetén megvizsgálták a kvark-antikvark párok létrejöttének valószínűségét, meghatározták az újonnan keletkezett részecskék sűrűségét. Az időfüggő párkeltési folyamatban a könnyebb és nehezebb kvarkok és antikvarkok keletkezési valószínűsége legfőképpen a térerősség változásának időbeli gradiensétől függ. Erős, de nagyon rövid életidejű terek esetén a nagy tömegű charm és bottom kvarkok hozamára sokkal nagyobb érték adódott, mintha a széles körben használt, időben állandó terekre alkalmazott Schwinger-mechanizmust használták volna. A részecskekeltés jellemző energia-skáláját nem a keletkezett részecske tömege, hanem a térerősség-impulzus szélessége határozza meg. A numerikus számolások azt mutatták, hogy már az LHC energiákon elvégzett nehézion-ütközésekben is az erős nem-ábeli tér megjelenése eredményeként a nehéz kvarkok hozama megközelítheti a ritka és könnyű kvarkok hozamát. Ez az eredmény ellentmond minden korábbi várakozásnak, ezért kísérleti vizsgálata fontos feladat lesz az LHC-nél a közeljövőben sorra kerülő nehézion-kísérletekben.

Időben és térben változó közegben a hadron rezonanciák spektruma változhat. Mivel a közeg nehézion-ütközésekben is változik, a közegbeli spektrumnak és változásának megfigyelése a kísérleti nehézion-fizika, egyszersmind a GSI FAIR CBM és PANDA együttműködéseinek is egyik fontos feladata. A változás figyelembe vétele lényeges, mert ekkor változik a detektorokban mérhető jel is. Az RMKI kutatói egy transzport-modellt dolgoztak ki, amelyben implementálták a Kadanoff-Baym egyenletből levezethető, a spektrál-függvény időbeli változását leíró egyenletet. A modellt alkalmazták a vektormezonokra, amelyek keltésük pillanatában a lokális állapotnak megfelelően módosított spektrál-függvénnyel

keletkeztek. Megmutatták, hogy az így kapott rendszer kielégíti a megmaradási tételeket, valamint az ütközés végére a vektormezonok visszanyerik vákuumbeli tulajdonságaikat. A GSI HADES spektrométerrel vizsgált ütközésekben dileptonokra a kísérleti eredményekkel jó egyezést kaptak. Azt találták, hogy könnyű rendszerben a vektormezonok közegbeli módosulása a kísérletileg mérhető spektrumban elhanyagolható változást okoz.

Plazmafizika és hűtött atomok fizikája

Az RMKI kutatói 2010-ben a MAST szférikus tokamagnál (Culham, Anglia) megépítettek egy kétdimenziós nyalábemissziós spektroszkópiás (NyES) diagnosztikai berendezést. Ez az első fűtőnyalábra tervezett mikroszekundum időfelbontású NyES diagnosztika Európában, amely szoros angol-magyar együttműködés eredménye. Az új eszközt elsősorban a plazmaturbulencia és plazmaáramlások vizsgálatára, illetve ezek kölcsönhatásának tanulmányozására fejlesztették ki. A berendezés előnye, hogy megfigyelési tartománya a vákuum-térben lévő tükrözésével széles tartományban változtatható. A diagnosztika egyik legfontosabb eleme egy alacsony zajú, alacsony fényszintre optimalizált kis térbeli, de nagy időfelbontást adó kameraegység, amelyet az RMKI egyik spin-off cége fejlesztett ki.

A TEXTOR tokamakon (Jülich, Németország) megépítettek egy lítium nyalábos NyES berendezést, és 2010-ben, több német csoporttal együttműködve, részletesen vizsgálták a plazmaturbulenciát és a zonális áramlásokat. Három mérési eljárás adatainak együttes feldolgozásával megállapították, hogy a periodikus zonális áramlások (Geodesic Acoustic Mode, GAM) a tokamak mindkét szögirányában szimmetrikusak, a kissugár mentén pedig jellegzetes fázismentet mutatnak. A plazma szélén kifelé terjedő áramlási modulációk láthatók. Részletesen tanulmányozták a turbulencia örvények dőlésének mágneses tér- és irányfüggését és a mágneses erővonalak menti hosszát.

Az RMKI munkatársai fejlesztik a greifswald-i Wendelstein W7X sztellarátor 10 csatornás video diagnosztikáját is. Ennek keretében sikeresen elvégezték a prototípus termikus és mechanikus tesztjét. Elkészítették a kamerákhoz használatos speciális objektívet és az EDICAM (Event Detection Intelligent Camera) 10Gbit-es linket használó prototípusát. Ezt a kamerát (a COMPASS tokamak mellett) az ASDEX Upgrade tokamakon is sikeresen installálták, és a diagnosztikai berendezés segítségével kriogén pelleteket követtek nyomon.

Az RMKI fizikusai és mérnökei által a prágai COMPASS tokamakra több éves munkával kifejlesztett lítium nyalábos diagnosztikai rendszert az év végén, a terveknek megfelelően, leszállították a prágai partner-intézetnek.

Több, a 2011. évben is folytatódó projektben teljesítették a 2010-es évre kitűzött mérföldköveket. Ilyen mérföldkö volt a W7X sztellarátorra tervezett kamerarendszer prototípusának kifejlesztése, a Lausanne-i TCV tokamak AXUV kamerarendszer diódafedő mechanikájának fejlesztése, a JET tokamak (Anglia, Culham) periszkóp fejének módosítása, valamint a garching-i ASDEX berendezésre készülő kamerarendszer nyitó-záró mechanikájának fejlesztése.

Az ITER, a Franciaországban építés alatt álló, kísérleti fúziós reaktor részére folytatott számos tervezési feladat közül a legnagyobb horderejű a „Trícium Szaporító Kazetta” (TBM) fő egységének, a kiszolgáló egységnek a koncepcionális tervezése, amelyet a Fusion for Energy ügynökség (Barcelona) által kiírt pályázat keretében végeztek.

Az intézet kutatói a Szegedi Egyetem Nagy Intenzitású Lézer Laboratóriumában egy lengyel csoporttal együttműködve Ar gázban konverziós méréseket végeztek 83nm hullámhosszon a rezonáns KrF 3. harmonikusra a lézer alaphullámhosszára érzéketlen gyémánt detektort használva. A 3ω mellett az 5ω és a 7ω jeleket is detektálták. Előzetes eredményeik szerint a konverziós faktor 10^{-3} volt, ami egy nagyságrenddel alacsonyabb egy korábbi hannoveri kísérletben leírtánál, de összhangban van saját korábbi eredményeikkel. Prágai kutatókkal együtt egy komplex interferometria diagnosztikát fejlesztettek ki, lehetővé téve a plazmasűrűség mérését a fő lézernyalábtól való 10ps – 6ns késleltetési tartományban. Az első kísérletek során levegőben keltett szikrát vizsgáltak. Megfigyelték a létrejött hosszú filamentum tágulását, és abban egy üreges szerkezet kialakulását észlelték.

Tanulmányozták a többnívós atomok és a rövid lézerimpulzusok közti kölcsönhatást. Az általuk kidolgozott eljárásokkal az atomok metastabil állapotai és a köztük levő koherenciák az atomok jelentős gerjesztődése nélkül manipulálhatók. Tripod-nívószerkezetű atommodellt alapul véve megvizsgálták a három alapállapot közötti koherencia tetszőleges időpontban való, determinisztikus előállításának lehetőségeit. Minimalizálták a gerjesztett állapotokból való spontán emisszió által okozott dekoherenciát. A transzverzális relaxáció által okozott dekoherenciát ultrarövid, frekvenciamodulált lézerimpulzusok alkalmazásával küszöbölték ki.

Új módszert fejlesztettek ki Zeeman-koherencia létrehozására ^{87}Rb atomokban a D2-vonal hiperfinom nívóinak mágneses alnívói között. Lengyel kutatókkal együttműködve a közegben haladó fény polarizációs síkjának elfordulását leíró nemlineáris Faraday-effektuson alapuló kísérleti eljárást javasoltak a mesterségesen létrehozott koherencia mérésére. Robusztus módszert fejlesztettek ki, amellyel olyan kvantumrendszerekben, ahol az átmenetek inhomogén kiszélesedése jelentős mértékű (például szilárdtest-közegekben), az optikai információ atomi nívók populációjára és a kvantumállapotok közti koherenciára képezhető le.

Egymást részben átfedő lézerimpulzusok által keltett többfotonos adiabatikus átmeneteket rubídium atomokban tanulmányozva megmutatták, hogy az atomi kvantumállapot akkor is hatékonyan kontrollálható, ha az atom energiaszintjei elfajultak és a mágneses alnívók közötti átmeneti mátrixelemek különbözőek. Ilyen lézerimpulzus-párokkal összefonódottságot sikerült létrehozniuk az atomok belső mágneses állapota és külső transzlációs állapota között.

Az elméleti eredmények kísérleti igazolása céljából keskeny sáv szélességű félvezető lézerek, valamint integrált elektro-optikai modulátor és lézererősítő alkalmazásával új módszert dolgoztak ki intenzív, időben változó frekvenciájú, nanoszekundumos lézerimpulzusok létrehozására. Meghatározták az impulzusok forrásaként használt lézer, az alkalmazott optikai elrendezés, a modulátor és az erősítő működtetésének optimális paramétereit. Módszereket dolgoztak ki a kapott csörpölt fényimpulzusok tulajdonságainak mérésére, az ehhez használt interferométerek jeleinek feldolgozására, amiből meghatározták az impulzusok frekvenciafutását. Az így előállított lézerimpulzusokkal csapdázott rubídium atomokat világítottak meg és megmérték az atomfelhő elmozdulását a fényimpulzusok kiinduló frekvenciájának és frekvenciafutásának függvényében. Megmutatták, hogy az új módon előállított lézerimpulzusokkal a hűtött atomcsomagokat koherensen lehet gyorsítani.

Űrfizika és űrtechnika

Modellezték a Jupiter belső magnetoszférájában található halvány porgyűrűt. Feltételezték, hogy a gyűrűt alkotó porszemcsék a bolygóközi mikrometeoroidok bombázása következtében lökődnek ki a Jupiter két belső holdja, a Metis és az Adrastea felszínéről. A porszemcsék a

Jupiter plazmakörnyezetében elektromosan feltöltődnek. A szemcsepotenciál szisztematikusan változik a Jupitertől való távolság függvényében, ami meglepően rövid szemcseélettartamokra vezet. Kiszámították a létrejövő porgyűrű térbeli sűrűségeloszlását és az optikai mélység eloszlásait. A modell jól reprodukálta a Jupiter gyűrű régiójának távcsöves és űrszondás (Voyager, Galileo, Cassini) megfigyeléseivel kapott eredményeket. A modell alapján megbecsülték a várható por beütésszámot, amit a Juno űrszonda majd 2016-ban vizsgálhat.

A Cluster-szondák adatait használva meghatározták a bolygóközi mágneses tér térbeli korrelációs függvényének különféle metszeteit és egy háromdimenziós korrelációs függvényt. A négy Cluster szonda a világon elsőként teszi lehetővé a bolygóközi mágneses mező térbeli változásainak alapos helyszíni vizsgálatát, amely nélkül a korrelációs függvény eddig nem volt meghatározható. A megfelelő adatok birtokában, most minden eddiginél pontosabb eredményeket kaptak, ráadásul mindhárom térbeli dimenzióban egyszerre. Kimutatták, hogy a mágneses tér fluktuációja alapvetően anizotróp, az anizotrópia egy háromtengelyű ellipszoiddal írható le, amelynek kvantitatív tulajdonságait is megadták.

A Cassini űrszonda adatainak használatával tanulmányozták a Szaturnusz körüli plazma tulajdonságait, különös tekintettel a Titán hold, és annak pályája körüli plazma-tartományra. Vizsgálataikban osztályozták az első ötven Titán megközelítés adatait a plazma ionkomponensének tulajdonságai alapján. A plazma-tulajdonságok statisztikai vizsgálata során kimutatták, hogy a plazma tulajdonságait elsősorban a Szaturnusz ún. mágneses lemezétől való távolság befolyásolja. Feltárták a mágneses lemez finomsztruktúráját. A lemez központi részén egy vékony, nehezebb ionokban nagyon gazdag tartományt találtak. Kimutatták, hogy ez a tartomány sűrűbb és hidegebb a környezeténél. Elemezték a plazmaváltozások hatását néhány kiválasztott Titán megközelítés során.

Az RMKI kutatói fontos fejlesztési tevékenységet végeztek az űrtechnika területén. Így egy új szoftvert készítettek az üstökös kutatásra 2004-ben indított Rosetta Philae leszállóegység központi vezérlő és adatgyűjtő számítógépéhez, amely már a szonda indulása óta szerzett új, pontosított ismeretek birtokában készült, és így alkalmas az üstökösnél történő szétválás, a leszállás és a talajtérés során szükséges vezérlési feladatok elvégzésére.

Elkészítették a Merkúr kutatására 2016-ban induló BepiColombo szondára kerülő PICAM kísérlet tápegysége elektronikájának elektromos modelljét, amelyet a kísérlet integrálásáért felelős grazi kutatók tesztelik és integrálják a SERENA/PICAM rendszerbe.

Svéd kutatókkal együttműködve javaslatot készítettek a Jupiter környezet kutatására a tervek szerint 2020-ban induló ESA szonda Plasma Environment Package (PEP) műszeregyüttesére. A kilenc detektort tartalmazó rendszer tápellátásáról szóló tanulmányt az RMKI fejlesztő mérnökei készítették. A feladat a súly, térfogat, határfok és megbízhatóság optimalizálása volt. Több mint tíz változat értékeléséről már három alkalommal tartottak előadást és a fejlesztők részt vettek az ESA-hoz benyújtott tanulmány elkészítésében is.

Biofizika

Az ún. spontán- és kiváltott neurális aktivitás nemzetközi kollaborációban végzett vizsgálatával megmutatták, hogy a vizuális kéreg neuronjainak aktivitása egy belső modell léteire utal, amely az egyedfejlődés során adaptálódik a környezetből érkező stimulusok statisztikájához. Demonstrálták, hogy a korábban zajnak feltételezett variabilitás a neuronok

adott stimulusra adott válaszaiban leírható egy funkcionális magyarázattal: a variabilitás nem más, mint a minták előfordulásának véletlenszerűsége egy valószínűségi eloszlásban.

Az egyedi idegsejteken folyó membránáramok meghatározását célzó kutatások során az idegszövetbe ültetett mikroelektróda rendszerek mérései alapján meghatározták a sejt membránáramai és az általuk létrehozott, a sejten kívüli folyadékban folyó áramok közötti összefüggéseket. Inverz modell-számításokkal a sejteken kívül mért potenciálokból rekonstruálták a membránpotenciált, ami eddig csak a sejtbe helyezett elektródával volt mérhető.

A Pfizer gyógyszergyárral elkezdett együttműködésben elemezték a génmódosított egerek nagyagykérgében és hippokampuszában mikroelektróda rendszerekkel rögzített, a skizofrénia megismerése szempontjából lényeges mikro-mezőpotenciálokat. Új lokalizációs módszerükkel feltárták a mért idegsejtek olyan tulajdonságait (például az axon irányítottságát), amelyekre eddig csak mikroszkópos festési eljárásokkal volt lehetőség.

Megvizsgálva a hippokampusz egyes területein a dendritikus információ-feldolgozás hatását az idegsejtek térbeli tüzelési mintázatára azt találták, hogy a piramis sejtek nagy dendritfája kedvez a lokális plaszticitásnak, ám a tüzelések kiváltásához a dendritikus kompartmentek összjátéka szükséges. Megvizsgálták a nemlineáris dendritfa szerepét olyan neurális hálózatokban, ahol az idegsejtek analóg jelekkel (pl. membránpotenciállal) végeznek nemlineáris számításokat, de digitális jelekkel (tüzelésekkel) kommunikálnak. Azt találták, hogy a számítások optimális implementációjához lokális nemlineáris alegységekre van szükség még akkor is, ha a számítás csak globálisan nemlineáris, vagy ha a bemeneti változók korreláltak.

Bármilyen irányított információ- és jelfeldolgozó hálózatra alkalmazható új módszert dolgoztak ki, amellyel kapcsolatot lehet teremteni a hálózat struktúrája és a hálózati csomópontok és élek jeltovábbításban és jelfeldolgozásban betöltött funkcionális szerepei között. A módszerrel modellhálózatok finomhangolását és valós hálózatok funkcionális osztályozását végezték el.

Megmutatták, hogy a szabadalmak által adott, illetve kapott hivatkozások olyan sokdimenziós teret feszítenek ki, amelyben távolság alapú osztályozással a technológiai ágak hierarchikus szerkezete felfedhető, és e szerkezetben megjelenő változások vizsgálatával az új technológiai ágak megjelenése felismerhető.

Informatika, e-tudomány (e-science)

A Worldwide LHC Computing Grid együttműködés keretében kibővítették az intézet BUDAPEST grid-állomását, amely így 500 processzorral és 170 terabyte tárolóval rendelkezik. Az állomás 97 %-os hatékonysággal működik, 120 állomás közül 2010-ben a 2. legeredményesebb Tier-2 központ volt. 2009 óta az RMKI vezeti a Magyar Grid Kompetencia Központ konzorciumot, amely belépett az EGI-InSPIRE nemzetközi projektbe. Ennek keretében az RMKI kulcsszerepet tölt be a magyar Nemzeti Grid Iniciatíva (NGI) kialakításában, működtetésében és fejlesztésében. A magyar NGI erőforrásainak túlnyomó részét, az összes központi szolgáltatást, továbbá az operatív feladatokat és a technikai koordinációt az RMKI grid csoportja nyújtotta.

A magyar egyetemekkel és vállalatokkal együtt létrehozott GENAGRID konzorcium keretében az RMKI 512 processzoros, 1 terabyte memoriájú, 6,5 teraflop teljesítményű SGI ALTIX ICE szuperszámítógépe teljes kapacitással működött. A genomikai feladatok

megoldására specializált számítógépen az emberi DNS szerkezetének asszociatív alapokon történő elemzését végzik. Az év során megjelentek az első szakmai publikációk is. 2010-ben befejezték a GPS navigációs program vakok számára is készült felhasználói felületének programozását és tesztelését. Az elkészült berendezésről beszámoltak az ICCHP konferencián, valamint több cikkben.

A MObil SegítőTárs (MOST) projekt folytatásaként, a Nav-N-Go Kft. navigációs motorját felhasználva, a rendszert átdolgozták egy új típusú PDA-ra (Airis T483). A új típusból 18 darabot vásároltak vak felhasználók, amelyeket üzembe helyeztek számukra és megtanították a MOST rendszer használatát a GPS navigációval együtt. Az új PDA-n működik egy FM rádió is, megtervezték és kifejlesztették ennek vak emberek által használható kezelő felületét. Az autisták kommunikációját támogató Talkpad programjukat egy új, női hangú beszédszintetizátorhoz illesztették, és tesztelésre átadták egy autista kislánynak.

Spanyol irányítással részt vettek az elektronikus akadálymentesítésnek az Európai Unió számára készült magyarországi monitorozásában.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

2010 az LHC éve volt a médiában. Az RMKI kutatói nagy lelkesedéssel tettek eleget a tájékoztatási elvárásoknak, rendszeresen interjúkat adtak közszolgálati és kereskedelmi TV- és rádió-csatornáknak, internetes újságoknak, ismeretterjesztő előadásokat tartottak középiskolákban és felsőoktatási intézményekben, valamint aktívan segítettek a folyamatosan friss híreket szolgáltató CERNBLOG (cernblog.worldpress.com) működését. Természetesen ilyen előadások nemcsak a nagyenergiás részecskefizika területéről, hanem a többi kutatási területről is többször elhangzottak. Ezzel a tevékenységükkel az RMKI kutatói jelentős mértékben hozzájárultak a tudományos célkitűzések közérthetőbbé tételéhez, a Magyar Tudományos Akadémia kutatóhelyein folyó tudományos munka társadalmi elfogadottságának és támogatottságának növeléséhez.

Az intézet kutatói tevékenyen részt vettek a középiskolai oktatás és felsőoktatás színvonalának emelésében. Ez különösen fontos a fizikaoktatás színvonalának mostani mélypontján. Az RMKI-ban 2010-ben sorrendben hetedszer szervezték meg a nemzetközi részecskefizikai diákműhelyt és aktívan részt vettek a középiskolai fizikatanárok CERN-beli továbbképzésében is. Számos ismeretterjesztő cikket írtak és előadást tartottak fizikatanári ankétokon és középiskolákban, valamint a Pécsen megrendezett Fizikus Vándorgyűlésen.

Előadást tartottak a Budapesti Neutron Központ (BNC) konzorciumon belül elindított ismeretterjesztő programban, illetve a Tudomány Ünnepe sorozat keretében szervezett egynapos, a neutronos anyagtudományi kutatásokról és fejlesztésekről szóló szimpóziumon.

Nagy érdeklődést váltott ki a 2010-ben hatodik alkalommal megrendezett Simonyi Nap. Az RMKI kutatói az intézet dolgozói és a szélesebb közönség előtt (120 résztvevő), közérthető nyelven számoltak be legújabb kutatási eredményeikről.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai kapcsolatok

Az RMKI aktív szakmai kapcsolatot tart fenn számos MTA kutatóintézettel, elsősorban a KFKI Telephely kutatóintézeteivel, valamint az ATOMKI-val. Így az RMKI az SZFKI-val,

az AEKI-vel és az MFA-val együtt alkotja a KFKI Condensed Matter Research Center (CMRC) konzorciumot, az SZFKI-val, az AEKI-vel és az IKI-vel a BNC konzorciumot. A BNC-n belüli SZFKI-IKI-RMKI konzorcium alkotja a CHARISMA (Cultural Heritage Advanced Research Infrastructures: Synergy for a Multidisciplinary Approach to Conservation/Restoration) EU FP7 projekt egyik FIXLAB platformját, amelynek sokoldalúságát az RMKI kihozott nyalábos PIXE mérések lehetővé tételével növeli. A hagyományosan erős ATOMKI kapcsolatokat a nagyenergiájú fizika területén közös pályázatok, a hazai ionnyaláb-fizikai berendezések hatékonyabb működtetése és fejlesztése céljából létrehozott „Magyar ionnyaláb-fizikai platform” (Hungarian Ion-beam Physics Platform, HIPP, <http://hipp.atomki.hu/>) és a European Centre for Theoretical Studies in Nuclear Physics and Related Areas (ECT, Trento, Olaszország) tevékenységében való együttes részvétel céljából megalakított “ECT-Hungary” konzorcium fémjelzik. Az RMKI aktív munkakapcsolatokat tart fenn a KK, a SZTAKI, a Konkoly Thege Miklós Csillagászati KI és az SZBK kutatóival is. Az RMKI SzHK az NIIF program regionális központja. Az RMKI tagja a Magyar Grid Kompetencia Központnak is, amelynek további tagjai a BME, az ELTE, az NIIFI és a SZTAKI.

Az RMKI egy-egy munkatársa az elnöke a széles magyar tudományosság számára elérhető Nemzetközi Elméleti Fizikai Műhelynek (NEFIM), a Szinkrotron Bizottságnak és a Dubna Bizottságnak. Ezen testületek adminisztratív és pénzügyi feladatait az RMKI látja el.

2010 jelentős sikere, hogy Szegeden épül meg az EU Extreme Light Infrastructure (ELI) program egyik nagy infrastrukturális beruházása, az attoszekundumos lézer berendezés. Az RMKI kutatócsoportjai együttműködnek az ELI projektben részt vevő magyar intézetekkel, így a Szegedi és a Pécsi Tudományegyetemmel, a BME-vel, valamint az SZFKI-val.

Az RMKI kutatói szimpóziumot rendeztek Budapesten a magyar magfizikai kutatások jelen helyzetéről és a közeljövőbeli hazai és európai lehetőségekről (30 résztvevő), valamint a grafikus processzorok tudományos kutatásokban való alkalmazhatóságáról (25 résztvevő) a terület magyar szakértőinek részvételével.

Az RMKI számos munkatársa tisztségviselője vagy tagja különféle akadémiai bizottságoknak és testületeknek, NKTH-bizottságoknak, az Eötvös Loránd Fizikai Társulatnak, különböző szakmai kuratóriumoknak, a hazai úrkutatás irányító testületeinek, stb.

Felsőoktatás

Az intézeti kutatócsoportok utánpótlásának biztosítása érdekében az RMKI kiemelkedő fontosságot tulajdonít a felsőoktatási intézményekkel kialakított szoros kapcsolatoknak. Nagyon fontos az egyetemi oktatásban való intézeti részvétel, BSc szinten a tudományos diákköri témák, MSc szinten a diplomamunkák, PhD szinten a doktori témák felajánlása és a kiválasztott témák vezetése. Az RMKI különösen szoros kapcsolatot ápol az ELTE TTK-n folyó fizikus- és a BME TTK-n folyó mérnök-fizikus képzéssel, valamint a debreceni, a gödöllői, a szegedi és a pécsi egyetemek fizikai intézeteiben folyó oktatással. 2010-ben 1400 órányi tananyagot adtak át a kurzusra bejelentkező diákoknak, valamint emelt szintű kísérleti laborgyakorlatot tartottak magfizikai és biofizikai témákban. RMKI munkatárs tartja a Szent István Egyetem Állatorvosi Karán a kötelező Biofizika előadásokat magyar és angol nyelven. Doktori iskolák törzstagja 12 RMKI-s kutató, további 6 munkatárs témavezetőként tevékenykedik. Az RMKI kutatóinak aktivitásának eredményeképpen 2010-ben 8 TDK dolgozatot, 10 BSc és 12 MSc dolgozatot nyújtottak be az intézettel kapcsolatban lévő

diákok, valamint 3 PhD dolgozat megvédésére került sor. Jelenleg 17 PhD dolgozat készül az intézetben. A kutatók részt vesznek az egyetemi bizottságok munkájában.

Nemzetközi kapcsolatok

Az RMKI-ban szinte valamennyi kutatás nemzetközi együttműködések keretében folyik, a legfontosabb szálak a CERN-hez, az ESA-hoz és az EURATOM-hoz kapcsolódnak, továbbá az RMKI a koordinátora a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium (USA) Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjénél (RHIC) az ELTE és a Debreceni Egyetem részvételével működő PHENIX-MAGYARORSZÁG kísérleti együttműködésnek is. Az RMKI kutatói aktív részvételével az elkövetkező években is fontos eredmények várhatók a kvark-gluon plazma előállítását megcélzó PHENIX és az ALICE, TOTEM nagyenergiás magfizikai kísérletekben. Külön kiemelendő az a tény, hogy 2010-ben az LHC CMS együttműködésben a QCD munkacsoport társ-koordinátorának két évre az RMKI kutatóját választották meg. Az RMKI kutatói továbbra is fontos szerepet játszanak a neutrínó tömegét mérő KATRIN (Németország) részecskefizikai kísérletben, valamint folytatódtak a csatlakozási előkészületek a GSI/FAIR közepes energiájú magfizikai kísérletekhez is. Az RMKI a közelmúltban csatlakozott és kutatói aktívan részt vesznek a gravitációs hullámokat mérő olaszországi VIRGO kísérletben. Egyre fontosabb szerepet kap a külföldi, elsősorban európai nagyberendezések (szinkrotronok, iongyorsítók, neutronforrások, tokamakok, sztellarátorok) mellett végzett, vagy azok létrehozására irányuló (pl. ITER, ELI) kutatás. Igen jelentős szerepet játszik az a nagyszámú egyéb kutatóhely is, melyekkel bilaterális vagy multilaterális kapcsolatokon keresztül folyik együttműködés. Közös kutatások a nukleáris anyagtudományban és az űrfizikában mintegy 35, részecskefizikában százat is meghaladó külföldi intézettel folynak, amelyek között a megfelelő szakterület legnevesebb intézményei szerepelnek, felsorolásuk messze meghaladná a beszámoló kereteit. Ezen túlmenően azonban az eredmények elérésében nagy szerepe volt az MTA bilaterális kapcsolatain alapuló megállapodásoknak, a Tét együttműködéseknek, valamint az MTA–EAI (Dubna) projekteknek is. Ezek megújítása az intézet prioritásai között szerepel. Az RMKI a magyar fúziós programot a Magyar EURATOM Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálja, és a többi magyar intézmény (AEKI, Széchenyi Egyetem, ATOMKI, BME, ELTE, Dunaújvárosi Főiskola) az RMKI közvetítésével vesz részt ebben a munkában. Az RMKI kutatói ezen a területen is számos nemzetközi bizottságban tevékenykednek, és már a mostani fázisban bekapcsolódtak a világ leendő első fúziós reaktorának, az ITER-nek a tervezési munkáiba. Fontos jele a nemzetközi elismertségnek, hogy 2010-ben Magyarországon került megrendezésre a 31. ECLIM konferencia, és a szervező bizottság elnöke az RMKI munkatársa volt.

A GSI/FAIR magfizikai kutatóközpont programjában való részvétel elősegítése céljából „Hot and Cold Baryonic Matter” címmel nemzetközi konferenciát rendeztek (50 résztvevő). Tizedszer rendezték meg a „Zimányi Winter School on Heavy Ion Physics” nehézion-fizikai iskolát, mely a kutatási terület egyik fontos nemzetközi rendezvényévé vált (50 résztvevő). Az RMKI kutatói működtetik a Cluster Magyar Adatközpontot, amely pálya- és egyéb kiegészítő adatokat szolgáltat az ESA (Európai Űrügynökség) négy, azonos műszerezettségű Cluster műholdjának tudományos adatrendszerébe. A biofizika (számítógépes agytudomány) területén eredményes nemzetközi pályázatok alapján folytatódik az aktív, professzor- és hallgatócserét is magában foglaló együttműködés a Kalamazoo College (Michigan University, USA) kutatóival, de kiemelendők még a Brandeis University, Waltham, MA, USA és a University of Cambridge, UK kutatóival folytatott kutatások is. Kutatási együttműködési szerződést kötöttek a Pfizer gyógyszergyárral, amelynek keretében elektrofiziológiai mérési adatokat kapnak tudományos elemzési céllal.

Az RMKI kutatói aktív résztvevői a nemzetközi tudományos közéletnek is. Azon hosszú távú feladattal rendelkező testületek közül, melyekben az RMKI kutatói képviselik a magyar érdekeket, a legfontosabbak a CERN Tanácsa és bizottságai, az EURATOM Scientific and Technical Committee, az EFDA Science and Technology Advisory Committee (vice-chair), a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA) szakértői bizottságai, a Joint Undertaking for ITER Governing Board, az EFDA Steering Committee, az Európai Fizikai Társulat (EPS), Int. Astronautical Academy (Board of Trustees, International Space Science Committee), a COSPAR, az European Science Forum on Research Infrastructures, az Európai Bizottság mellett működő FP7 Research Infrastructures programbizottság, a IUPAP, a COST DC MPNS (Domain Committee for Materials, Physical and Nanosciences), COST TDP SAB (Trans-Domain Proposals Standing Assessment Body), az ESF Standing Committee for Physics and Engineering (PESC) és a NUPECC, European Neural Network Society Executive Committee, EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication), a Linux kernel Netfilter/IPtables komponensének fejlesztését végző nemzetközi munkacsoport.

Az RMKI számos munkatársa nemzetközi folyóiratok referense, több kutatója tagja nemzetközi folyóiratok szerkesztő és tanácsadó bizottságának, nemzetközi konferenciák tanácsadó vagy programbizottságának, külföldi kutatóintézetek tudományos tanácsának és referensi bizottságainak. Az RMKI kutatóinak elismertségét nemcsak a számos konferencia-előadásra szóló meghívás jelzi, hanem a rangos nemzetközi bíráló-bizottsági részvételre szóló ismételt felkérések is (pl. ERC Advanced Grant Evaluation Panel, ERC Starting Grant remote evaluation, COST Proposal Evaluation Board, CNRS, stb.).

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az RMKI-ban folyó kutatások anyagi fedezetét az MTA költségvetési támogatása és az elnyert külső források nyújtották 2010-ben is. Ez utóbbiak nagysága csökkenni kezdett: 2010-ben hazai pályázat kiírására nem került sor, az említett sikeres projekteket még 2009-ben hirdették meg.

Egy munkatárs elnyerte a European Research Council Starting Independent Research Grantját, 5 év futamidőre 1,1 millió euro támogatással. A pályázat keretében korszerű, szinkrotronsugárzáson alapuló röntgenspektroszkópiai módszerekkel vizsgálnak változtatható elektronállapotú („kapcsolható”) átmenetifém-vegyületeket, továbbá ultragyors időskálán fizikai, kémiai és biológiai átalakulások elemi lépéseit tanulmányozzák.

Az EU FP7 program keretében támogatást nyert az EGI InSPIRE projekt, amelynek célja a nemzetközi grid-technológia fejlesztése. Résztvevői a Magyar Grid Kompetencia Központ tagjai, valamint egy Marie Curie Intra-European Fellowship pályázat lett nyertes biofizikai témakörben. A CHARISMA EU FP7 projekt pénzügyi forrása 2010-ben vált hozzáférhetővé, ezzel lehetővé vált az érdemi munka megkezdése. Az intézet a Plan for European Cooperating States (PECS) keretében a „Participation in the Assessment Study for the Jupiter Ganymede Orbiter” másfél évre szóló támogatást nyert el. OTKA támogatást nyert a térelmélet területén kutató csoport, valamint elkezdődött az OTKA-NKTH támogatása a magyar LHC CMS csoportnak. Ez utóbbi projekt koordinálja 4 magyar intézmény 32 kutatójának részvételét a CMS együttműködésben.

Az NKTH átszervezésével kapcsolatos bonyodalmak nagyon hátrányosan érintették az intézetet, mivel 2010-ben a futó projektekre gyakorlatilag semmilyen esedékes támogatást sem folyósítottak, ezzel komoly likviditási gondokat okozva. Ráadásul például még 2010 tavaszán az intézet több kozmikus fizikai és űrtechnikai pályázatát nyertesnek hirdették ki, de majd fél évvel később adminisztrációs hibára hivatkozva a nyertes pályázatokat törölték, kifizetés nem történt. Hasonló probléma merült föl egy mobilitást segítő NKTH pályázatnál, ahol a nyertes 2 évre támogatást kapott, azonban a mai napig nem folyósították számára az anyagi támogatást. Ugyanígy járt az NKTH által támogatandónak ítélt TÉT Magyar-Dél-Afrikai projekt is. A korábban elkezdett Magyar-Szerb és Magyar-Vietnami projektek ugyanakkor sikeresen működtek.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Lévai P, Skokov VV: Nonperturbative enhancement of heavy quark-pair production in a strong SU(2) color field. Phys. Rev. D, 82: 074014 (2010)
2. Csörgő T, Vértési R, Sziklai J: Indirect observation of an in-medium eta' mass reduction in $\sqrt{s_{NN}}=200$ GeV Au+Au collisions. Phys. Rev. Lett., 105: 182301 (2010)
3. Khachatryan V, Aranyi A, Bencze G, Boldizsár L, Debreczeni G, Hajdu C, Horváth D, Krajczár K, László A, Siklér F, Vesztergombi G, CMS Collaboration (1967 szerző): Transverse momentum and pseudorapidity distributions of charged hadrons in pp collisions at $\sqrt{s}=0.9$ and 2,36 TeV. J. High Energy Physics, 1002: 041 (2010)
4. Khachatryan V, Aranyi A, Bencze G, Boldizsár L, Debreczeni G, Hajdu C, Horváth D, Krajczár K, László A, Siklér F, Vesztergombi G, Pásztor G, CMS Collaboration (2322 szerző): First Measurement of Bose-Einstein Correlations in Proton-Proton Collisions at $\sqrt{s}=0.9$ and 2.36 TeV at the LHC. Phys. Rev. Lett., 105: 032001 (2010)
5. Khachatryan V, Aranyi A, Bencze G, Boldizsár L, Debreczeni G, Hajdu C, Horváth D, Krajczár K, László A, Siklér F, Vesztergombi G, Pásztor G, CMS Collaboration (2324 szerző): Transverse momentum and pseudorapidity distributions of charged hadrons in pp collisions at $\sqrt{s}=7$ TeV. Phys. Rev. Lett., 105: 022002 (2010)
6. Aamondt K, Agócs AG, Barnaföldi GG, Boldizsár L, Dénes E, Fodor Z, Hamar G, Lévai P, Molnár L, Pochybova S, Tölyhi T, ALICE Collaboration (1056 szerző): Charged-particle multiplicity measurement in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 0.9$ and 2.36 TeV with ALICE at LHC. Europ. Phys. J., C68: 89 (2010)
7. Aamondt K, Agócs AG, Barnaföldi GG, Boldizsár L, Dénes E, Fodor Z, Hamar G, Lévai P, Molnár L, Pochybova S, Tölyhi T, ALICE Collaboration (1056 szerző): Midrapidity antiproton-to-proton ratio in pp collisions at $\sqrt{s} = 0.9$ and 7 TeV measured by the ALICE experiment. Phys. Rev. Lett., 105: 072002 (2010)
8. Adare A, Csörgő T, Ster A, Sziklai J, Vértési R, Zimányi J, PHENIX Collaboration (428 szerző): Enhanced production of direct photons in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV and implications for the initial temperature. Phys. Rev. Lett., 104: 132301 (2010)

9. Fodor G, Forgács P, Mezei M: Mass loss and longevity of gravitationally bound oscillating scalar lumps (oscillatons) in D-dimensions. Phys. Rev. D, 81: 064029 (2010)
10. Fodor G, Forgács P, Mezei M: Boson stars and Oscillatons in an inflationary universe. Phys. Rev. D, 82: 044043 (2010)
11. Barz HW, Kämpfer B, Wolf Gy, Zétényi M: Propagation of Vector-Meson Spectral-Functions in a BUU Type Transport Model: Application to Di-Electron Production. The Open Nuclear & Particle Physics Journal, 3: 1 (2010)
12. Bíró TS, Ván P: About the temperature of moving bodies. Europhysics Letters, 89: 30001 (2010)
13. Vankó G, Glatzel P, Pham V-T, Abela R, Grolimund D, Borca CN, Johnson SL, Milne CJ, Bressler C: Picosecond Time-Resolved X-Ray Emission Spectroscopy: Ultrafast Spin-State Determination in an Iron Complex Angew Chem. - Int Ed, 49: 5910 (2010)
14. Szilágyi E: Energy and depth resolution in elastic recoil coincidence spectrometry. Nucl. Instr. Meth., B268: 1731 (2010)
15. Solano ER, Kocsis G, et al.: JET EFDA Collaboration (31 szerző): Observation of confined current ribbon in JET plasmas. Phys. Rev. Letters, 104: 185003 (2010)
16. Dunai D, Zoletnik S, Sárközi J, Field AR: Avalanche photodiode based detector for beam emission spectroscopy. Rev. Sci. Instrum, 81: 103503 (2010)
17. Demeter G: Quantum control of multilevel atoms with rotational degeneracy using short laser pulses. Phys. Rev. A, 82: 043404 (2010)
18. Dzotjan D, Sorensen AS, Fleischhauer M: Quantum emitters coupled to surface plasmons of a nanowire: a Green's function approach. Phys. Rev. B, 82: 075427 (2010)
19. Földes IB, Csáti D, Szűcs FL, Szatmári S: Plasma mirror and temperature evolution for short pulse KrF lasers. Radiation Effects and Defects in Solids, 165: 429 (2010)
20. Erdős G, Balogh A: North-South asymmetry of the location of the heliospheric current sheet revisited. J. Geophys. Res., 115: A01105 doi:10.1029/2009JA014620 (2010)
21. Horányi M, Juhász A: Plasma conditions and the structure of the Jovian ring. J. Geophys. Res., 115: A09202, doi:10.1029/2010JA015472 (2010)
22. Németh Z, Facskó G, Lucek EA: Correlation Functions of Small-Scale Fluctuations of the Interplanetary Magnetic Field. Solar Physics, 266: 149 (2010)
23. Fischer J, Berkes P, Orbán G, Lengyel M: Statistically optimal perception and learning: from behavior to neural representations. Trends in Cognitive Sciences, 14: 119 (2010)
24. Dézi I, Fetzer Cs, Bujdosó L, Brötz J, Balogh AG: Mechanical alloying of Fe–Si and milling of α - and β -FeSi₂ bulk phases. J. Alloy Compd., 508: 51 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	214	Ebből kutató ² :	125
PhD, kandidátus:	63	MTA doktora:	24
		Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			29

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			594
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			585
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	3	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 412
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 401
Könyv ⁸	magyarul:	1	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	6	idegen nyelven: 12

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	985,3	Összes független hivatkozás száma:	4355
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	5723		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	7	MTA doktora:	1
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			196
		posztterek száma:	28
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	68	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	15
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	17		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			23
Témavezetések száma: TDK munka:	8	Diplomamunka (BSc):	12
Diplomamunka (MSc):	22	PhD:	29

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		897,77	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	14	Teljes saját bevétel:	426,55 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			30
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	98,19	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			7
NKFP:	6	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			4
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	86,37	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			45
EU forrásból:	37	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	166,57 MFt
Egyéb:	8	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	86,49 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		70,63	MFt

KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, XII. Konkoly-Thege út 15-17
telefon: 1-391 9322; fax: 1-275 4668
e-mail: abraham@konkoly.hu; honlap: www.konkoly.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A beszámolási időszakban az intézet az alapító okiratban rögzített feladatainak megfelelően alapkutatót végzett, valamint több egyetemen részt vett a felsőfokú oktatással kapcsolatos feladatok ellátásában. A fentiekkel összhangban az intézet az alábbi témakörökben folytatott eredményes kutatómunkát:

- *A csillagok és a Nap fizikája, belső szerkezete, fejlődése*
 - A csillagok belső szerkezete és pulzációja
 - Aktív jelenségek csillagok légkörében
 - Napaktivitás
- *A csillagok körüli tér, benne a Naprendszer, kutatása*
 - Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája
 - Exobolygórendszerek
 - A Naprendszer égitestjei
- *Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások*
 - Gamma-kitörések
 - Csillagászat-történet

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

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A csillagok belső szerkezete és pulzációja

Az intézet kutatói új dinamikai jelenséget: periódus-kettőződést találtak három – a Kepler-űrtávcső által megfigyelt – RR Lyrae csillagban (RR Lyr, V808 Cyg és V355 Lyr). Ez az első ilyen jellegű megfigyelés ebben a csillagtípusban. A fénygörbében alternáló maximumok és minimumok, míg a frekvenciaspektrumban a fő pulzációs frekvencia és harmonikusai között félúton megjelenő fél-egész frekvenciák jelzik a periódus-kettőződés jelenlétét. Négy másik csillag szintén mutat periódus-kettőződésre utaló jeleket. Érdekesség, hogy ezen csillagok mindegyike Blazskó-effektust is mutat. Azt találták, hogy a jelenség a modulációs ciklus bizonyos fázisaiban erősebb, mint máskor. Úgy tűnik, a periódus-kettőződés és a rejtélyes Blazskó-effektus között szoros kapcsolat lehet, s az új jelenség lökést adhat az évszázados probléma megoldásához is.

A Florida-Budapest hidrodinamikai kóddal sikerült reprodukálni a periódus-kettőződéses bifurkációt nemlineáris RR Lyrae modellekben. Ez lehetővé tette, hogy azonosítsák a periódus-kettőződést okozó mechanizmust, ami egy magas rendű (9:2) rezonancia, amely az

alaplómódus, és a kilencedik felhang között jön létre. Ez utóbbi minden esetben ún. „strange módus”. A rezonancia annyira erős, hogy akár 10%-kal is elhangolhatja a szóban forgó felhang periódusát. Ezeket a rezonanciákat idáig nem vették figyelembe az elméleti vizsgálatokban. Eredményeik azt mutatják, hogy a radiális és minden bizonnyal a nemradiális módusok között is komplex kölcsönhatások jönnek létre az RR Lyrae csillagokban, melyeknek fontos szerepük lehet a Blazskó-effektus kialakításában és magyarázatában.

Huszonkilenc RR Lyrae csillag fényváltozását elemezték a Kepler 138 nap hosszúság megfigyelései alapján. 14 közülük Blazskó-effektus mutató csillag, amelyek mindegyike egyidejű amplitúdó- és fázismodulációt is mutat. A Blazskó-periódusok 27,7 naptól több mint 200 napig terjednek. A V445 Lyr jelű csillagnál az 53,2 napos Blazskó-cikluson felül egy hosszabb, másodlagos változás is látszott. A Kepler egyedülálló pontossága az eddigi legkisebb modulációs változások kimutatását tette lehetővé. Ezen felül, a jól ismert harmonikus és modulációs csúcyszerkezet mellett egyéb frekvenciákat is találtak a frekvenciaspektrumban. Négy csillagban ezek a frekvenciák közel esnek az első és/vagy a második felhang frekvenciájához. Ezen frekvenciákhoz tartozó amplitúdók a Blazskó-ciklussal szinkronban változnak. A V350 Lyr jelű csillag az első olyan két módusú RR Lyrae, mely az alapmódusban és a második felhangban pulzál.

A CoRoT műhold által talált új, Blazskó-modulált RR Lyrae csillag (CoRoT 101128793) űrfotometriai adatait vizsgálták. A Blazskó-effektus nagysága egyike az RR Lyrae csillagokban eddig megfigyelt legkisebbeknek. Összesen 79 frekvenciát azonosítottak, amelyek többsége a fő pulzációs frekvenciával és annak harmonikusával, a Blazskó-frekvenciával, valamint kombinációs frekvenciákkal azonosítható. A spektrum ezeken felül két további frekvenciát tartalmaz, melyek közül az egyik valószínűleg a második radiális felhanggal magyarázható.

2010-ben lezárták a CZ Lacertae Blazskó-csillagról két észlelési szezonban, 2004-ben és 2005-ben a Sváb-hegyi 60 cm-es távcsővel gyűjtött BVRI fénygörbék analízisét. E vizsgálat feltárta, hogy a CZ Lac fénygörbéje egyszerre két modulációs periódussal (kb. 14,6 és 18,6 nappal) modulált. Ez az első több periodikus Blazskó-effektust mutató csillag, amelynél mindkét modulációs periódus egyértelműen és pontosan megállapítható. A két moduláció hasonló erősségű. A modulációk periódusai és amplitúdói a két szezon között jelentősen megváltoztak miközben a közepes pulzációs amplitúdó kissé csökkent. A modulációs frekvenciák 5:4 rezonanciában voltak az első szezonban, ezt követően a frekvenciák ellentétes irányba változtak és a 4:3 rezonancia közelébe kerültek a rákövetkező szezonra. A 2004-es szezonban a két moduláció kölcsönhatásaként a fénygörbe burkolója lebegési effektust mutatott 74 nap periódussal, ami hasonló az RR Lyr korábban megfigyelt 4 éves modulációerősség-változási ciklusaihoz.

Vizsgálták a cefeidák fénygörbe-alakjának fémtartalomtól való függését a Fourier-együtthatók segítségével. Ezt a vizsgálatot extragalaktikus cefeidákra is kiterjesztették a Hubble-űrtávcsővel észlelt cefeidák fotometriai adatainak elemzésével. Az extragalaktikus cefeidák fénygörbealakjának vizsgálatára vonatkozó eredmények megerősítették azt a korábbi megállapításukat, hogy a ϕ_{31} Fourier-paraméter nagyon érzékeny a cefeida fémtartalmára. Kimutatták, hogy a 2 kpc-nél közelebbi cefeidákra a Hipparcos-katalógusban közölt negatív parallaxisok minden esetben kettős rendszerbe tartozó cefeidáknál fordulnak elő. Ez alátámasztja azt a tényt, hogy a fel nem ismert vagy figyelembe nem vett kettősség meghamisítja a trigonometrikus parallaxist.

A Kepler indítása előtt az űrtávcső látómezejébe eső cefeida jelölteket válogattak (szám szerint 40-et) előzetes égboltpelmérések és adatbázisok alapján. A jelöltek 322 nap hosszúságú Kepler adatsorát vizsgálták, ezen kívül földfelszíni spektroszkópiai és többszín-

fotometriai kampányt szerveztek. Az adatok együttesen lehetővé tették, hogy megerősítsék a V1154 Cyg cefeida klasszifikációját. A fáziskésés módszerét alkalmazva megállapították, hogy a csillag alapmódusban pulzál, 4,9 napos periódussal. Az új radiálissebesség-adatok konzisztensek a régebbi mérésekkel, és valószínűtlenné teszik egy hosszú periódusú másodkomponens jelenlétét. A precíz, gyakorlatilag megszakításmentes fotometriai adatsorban a mikromagnitúdós szintig nem találtak nemradiális vagy sztochasztikusan gerjesztett módusokra utaló jeleket. Kimutatták, hogy a többi jelölt nem cefeida.

A piszkéstetői 1 m-es RCC-teleszkóppal részt vettek a WET (Whole Earth Telescope) 2002-2003-as nemzetközi fotometriai kampányában, melynek fő célpontja egy rövid periódusú B szubtörpe (sdB) csillag, a KPD 1930+2752 volt. Az objektum ellipszoidális változó, a kettős rendszer keringési periódusa kicsivel több, mint két óra. A kísérő valószínűleg fehér törpe, és a rendszer össztömege meghaladja a Chandrasekhar-határt, így egy Ia típusú szupernóva-progenitorral van dolgunk. A 355 órányi WET-adat alapján 68 pulzációs frekvenciát találtak, és 13 további frekvencia valószínűsíthető a zsúfolt, összetett és időben is változó frekvenciaspektrumban. Az eredmények alapján egy rendkívül bonyolult pulzátor képe rajzolódik ki, amely egyaránt mutat rövid időskálájú amplitúdó-változást, forgás miatti felhasadt módusokat, gömbszimetriától való eltérést, árapály keltette pulzációs módusokat és relativisztikus Doppler-effektust.

A Tejútrendszer legidősebb csillagpopulációját tartalmazó gömbhalmazok multiobjektum-spektroszkópiái vizsgálatait kiterjesztették a halmazfejlődés irányába. A 47 Tucanae jelzésű objektumnál a több mint 3000 halmaztag sebességeloszlásának vizsgálatából kinematikailag két populáció jelenlétére következtettek, amire lehetséges magyarázatot adhat két protogömbhalmaz egybeolvadása kb. 7,3 milliárd évvel ezelőtt. A hipotézis természetes magyarázatot ad a 47 Tuc rendszerszerű forgására, illetve csillagainak ellipszoidális térbeli eloszlására. Az összesen 14 gömbhalmazból álló teljes minta egyetlen halmazában sem találtak szignifikáns utalást sötét anyag jelenlétére, ugyanakkor a sebesség-diszperzió átlagos értékének helyfüggése a Tejútrendszeren belül mutatja a galaxisunk gravitációs terének árapály-fűtő hatásait.

Aktív jelenségek csillagokon

A TYC 2627-638-1 jelű objektumot BV(RI)_C és JHK_s fotometria, valamint kis és nagy felbontású spektroszkópia segítségével vizsgálták. Az objektum két fősorozati vagy fősorozat előtti G színképtípusú csillagból áll, amelyek valószínűleg egy tág kettős rendszert alkotnak. A radiálissebesség-változás arra utal, hogy a fényesebb komponens körül egy szubsztelláris kísérő kering. A fényesebb komponens mellett valószínűleg egy halvány, késői típusú csillag is található. A rendszer mindkét fényes komponense Ca II H és K emissziót és telített H α abszorpciót mutat, vagyis mindkettő aktív csillag. A fotometriai mérések néhány század magnitúdós, feltehetőleg foltok okozta modulációt mutatnak. A fényességváltozásokban két (3,5 és 3,7 napos) periódus látható, amelyről – a két komponensről külön készült fotometria alapján – megállapították, hogy a fényesebb csillag foltjainak köszönhető. A halványabb komponens egy jóval lassúbb változást mutat kb. 0,3 magnitúdós amplitúdóval. Emellett mindkét csillagon megfigyelhető hosszú időskálájú változás is. A halvány komponens spektrális energia-eloszlásában közeli infravörös többletet figyelhetünk meg.

Az EY Dra és a V374 Peg esetében a fotoszféra és a kromoszféra jelenségeit vizsgálták párhuzamosan fotometriai mérések és a H α színképek segítségével. Az EY Dra-on látható erős kromoszférikus emisszió korrelációt mutat a fotoszféra aktív régióival, ami ezek kapcsolatára utal. Az EY Dra-on a fotoszféra aktivitása hetes időskálán stabil, míg a V374 Peg éjszakáról éjszakára változik. A V374 Peg-n két erős flert figyeltek meg: egyet a H α

spektrumokban, egyet pedig a fotometriai adatsorban, emellett tizenkét kisebb fler is látható volt a kilenc éjszaka alatt. A két csillag a teljes konvekció határa alatt, illetve fölött található, így az aktivitási jellegük összehasonlítása segíthet a különböző felépítésű csillagokban működő dinamómechanizmusok megértésében.

A V889 Her gyorsan forgó ($P_{\text{rot}} \sim 1,337$ nap) fiatal, aktív csillag azért különösen érdekes, mert a fiatal Naphoz hasonlít. Kromoszférajáról és fotoszférájáról összegyűjtött észlelések feldolgozásával elvégezték a légkör rétegeinek feltérképezését. Először a csillag tulajdonságait, paramétereit pontosították, illetve magas szélességeken megjelenő foltosodást valószínűsítettek kb. 1500 K hőmérsékletkülönbséggel. Ez utóbbit a Doppler-leképezéssel is megerősítették. A kromoszférikus emisszió forgási modulációját foltmodellezés alapján a Napon megfigyelhető fáklýamezőkre emlékeztető aktív területekkel magyarázták. A Doppler-leképezést egy differenciális rotációt feltételező paraméterkereső eljárással kiegészítve újra elvégezték, amelynek eredményeként gyenge ám egyértelmű Nap típusú felszíni nyírást tapasztaltak $\Delta\Omega/\Omega \sim 0,009$ nyírási paraméterrel.

Napaktivitás

A Nap egy aktív vidékének pereméről plazma-kiáramlásokat figyelt meg a Hinode/EIS műszere. Ezek eredetét vizsgálták háromdimenziós MHD szimulációk segítségével. A szétoszlóban lévő aktív vidék egy koronalyukban, azaz a bolygóközi tér felé nyitott mágneses környezetben helyezkedett el. Az észlelt mágneses paraméterekkel indított szimulációban plazmakiáramlás jelent meg a fejlődő (táguló) aktív vidék közvetlen környezetében a koronalyuk nyitott erővonalai mentén. A szimulációban megjelenő plazmaáramlások fizikai jellemzői igen hasonlóak voltak a megfigyeltekhez. Ez a mechanizmus működőképes lehet gyakoribb mágneses konfigurációkban is, így az aktív vidékekben általánosan megfigyelt plazmakiáramlások egyik lehetséges hajtó mechanizmusa lehet.

A 2006. december 13-án és 14-én megfigyelt két koronakitörés következményeit tanulmányozták Hinode/EIS és XRT, SOHO EIT és MDI, valamint $H\alpha$ adatok felhasználásával. Kimutatták, hogy az anyagkidobás miatt elsötétült koronaterület strukturált volt: erősebb kiáramlások a nagyléptékű koronahurkok talppontjai közelében voltak megfigyelhetők. Ahogyan a korona lassan regenerálódott, a plazma kiáramlási sebessége jelentősen lecsökkent, de a kiáramlások dinamikusak és komplikáltak maradtak. A korona kifényesedése új, fényes koronahurkok megjelenésének volt tulajdonítható.

A Nap képein a granulák közti nagyobb, sötétebb tartományok és a kis méretű napfoltok képi tulajdonságai igen hasonlóak, és ezért nehezen különböztethetők meg. De ha megfelelő gyakorisággal készített képeink vannak, ezen lehet segíteni. Ennek a problémának a megoldására kifejlesztettek egy programot, amely különösen hasznosnak bizonyult az SDO (Solar Dynamic Observatory) képek feldolgozásánál.

Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája

Feldolgozták a PV Cephei fiatal eruptív csillagról több éven át gyűjtött optikai és infravörös fotometriai és optikai spektroszkópiai adatokat. A PV Cep fényessége az I_C sávban 2005 és 2009 között mintegy 4 magnitúdónyit csökkent. A tömegbefogást (akkréció) jelző Ca II emissziós vonalak alapján számolt akkréciós ráták azt mutatják, hogy a PV Cep akkréciós luminozitása a fotoszféráival azonos nagyságrendű, és a vonalak fluxusváltozása szerint ebben az időszakban az akkréciós ráta csökkenése csak nagyjából 1 magnitúdó halványodásról adhat számot. A halványodás nagyobb része a csillagot körülvevő anyag extinkció-növekedésének eredménye. A változások időskálája kizárja, hogy a

többletextinkciót a korong aszimmetriája vagy egyéb inhomogenitásai okozzák. Megmutatták, hogy az extinkció-változás szorosan összefügg a változó akkrécióval: a központi forrás luminozitása és hőmérséklete lecsökkent, így az akkréciós korong belső tartományainak hőmérséklete is lecsökkent és ezért por kondenzálódott benne. Az újonnan keletkezett por lehet a többletextinkció forrása. Mivel a por szublimációs tartománya a csillag—korong-rendszer 2 mikronos többletsugárzásának fő forrása, a szublimációs sugár csökkenése a K_s magnitúdó esésében is tetten érhető.

A Spitzer-űrtávcső MIPS kameráját, illetve IRS spektrográfját felhasználva 82 F színképtípusú csillag körül kerestek port. Huszonhét csillagnál találtak törmelékkorongot, ezek közül kilenc új felfedezés. A HD 50571 és HD 170773 jelű csillagok körüli por eloszlását marginálisan kiterjedt a MIPS kamera 70 μm -es felvételein. A MIPS és IRS méréseket további infravörös és szubmilliméteres mérésekkel kombinálva a legtöbb korongjuknál nagyon jó színképi lefedettséget sikerült elérni. Huszonkét törmelékkorongnál a megfigyelt infravörös többletet egy hőmérséklet-komponensű porgyűrű modellel, öt esetben pedig két hőmérséklet-komponensű modellel sikerült illeszteni. Az utóbbi rendszerek esetén a csillag körül valószínűleg két porgyűrű található. A várakozásokkal összhangban a korongok luminozitási aránya a rendszerek korával csökken, a tapasztalt csökkenési ráta a fejlődési modellek által jóslottnak megfelelő. A porgyűrűk csillagoktól mért távolságainak eloszlása összhangban van mind az „öngerjesztett”, mind pedig az esetleges nagybolygók által gerjesztett korongokra – modellekből számolt – jellemző eloszlásokkal.

A Radial Velocity Experiment (RAVE) felmérés radiális sebesség adatait egyéb asztrometriai információkkal kiegészítve három közeli fiatal mozgási halmaz (β Pic mozgási halmaz, ϵ Cha és Tucana-Horologium asszociációk) eddig ismeretlen új tagjai után kutattak. Szigorú kritériumokat alkalmaztak a lehetséges hamis jelöltek kiszűrésére, megkövetelve, hogy a röntgen tartományban mért tulajdonságaik, illetve elhelyezkedésük a szín-fényesség diagramon hasonló legyen a már ismert halmaztagokéhoz. Nagyfelbontású optikai spektroszkópiai méréseket felhasználva sikerült további bizonyítékokat is szerezni a kiválasztott célpontjaink halmaztagságáról. Amellett, hogy a három csoport 10 már korábban is ismert tagját „újra felfedezték”, hét új késői (K, M) színképtípusú tagot azonosítottak. Az új tagok listáját még két további taggal – HD 25402 és HD 160305 – bővítették.

Általánosan elfogadott elképzelés, hogy a fiatal, kis tömegű csillagok korai fejlődésük során a tömegüket időben nem egyenletesen gyűjtik be környezetükből. Néhány hónapos-éves időszakokra a forrásokra jellemző akkréciós ráta akár három nagyságrenddel is megnőhet – ilyenkor több energia szabadul fel és a forrás kifényesedik. A kitörések során megváltozhat a csillag körüli korong szerkezete, a benne található por összetétele. Így a kitörések a Naphoz hasonló csillagok bolygórendszereinek kialakulását is befolyásolják. A V1647 Ori jelű eruptív csillagot a 2003-2006-os kitörése alatt vizsgálták, hogy jobban megértsék a kitörésekhez kapcsolódó folyamatokat. A beágyazott forrást a kitörés során kétszer sikerült megfigyelni a Very Large Telescope Interferometer (VLTI) MIDI műszerével. A VLTI adatokat optikai, infravörös és szubmilliméteres fotometriai adatokkal egészítették ki. A kitörés elején megfigyelhető volt, ahogyan a por (szublimációs) sugara kitolódott a megnövekedett hőmérséklet hatására. A kitörés végéről származó adatokat, főként a második MIDI mérésből származókat, egy módon lehetett értelmezni: a burok anyagát 3 CSE távolságon belülről valami (pl. szél, kifúvás) kimozgatta.

Exobolygórendszerek

Az intézet kutatói felfedeztek 4 újabb fedési exobolygót, melyek közül csak egy érdekesebbéről lesz itt szó.

A HAT-P-15b egy G5 típusú fősorozatbeli csillag körül enyhén elliptikus pályán keringő 2 M_J tömegű bolygó. A pálya fél nagytengelye közel van a 0,1–1 CSE intervallumban található ún. „periódus völgyhöz”, a ma ismert exobolygók által viszonylag ritkábban populált régióhoz. A kapott tömeg- és sugárértékeket összevetve a különböző tömeg- és kémiai elem-eloszlású modellekkel, azt találták, hogy a bolygó tömegének mintegy 2%-át alkotják fémek (valószínűleg a magban koncentrációva). A tömeg fennmaradó részét pedig hidrogén és hélium alkotja. Fontos megjegyezni, hogy HAT-P-15b nem mutatja a szokásos sugáranomáliát. Ennek valószínű oka az, hogy a bolygó a csillagtól már elég távol kering ahhoz, hogy a besugárzás miatti, eddig még nem teljesen felderített effektusok ne játszanak fontos szerepet az egyensúlyi sugár kialakításában. A rendszer jó célpont a kevésbé forró bolygóléggörök transzmissziós spektroszkópiával történő tanulmányozására, hiszen átvonulása az apasztrонhoz közel történik, így ennek idején a becsült egyensúlyi hőmérséklet mintegy 820 K.

Tanulmányozták a fedési exobolygók Rossiter-McLaughlin effektusát, különös tekintettel a radiális sebesség-görbék és tranzitmérések kombinálásából adódó fizikai paraméterekre. Nagy számú numerikus szimuláció elemzésével azt kapták, hogy az effektusból az exohold sugarára kaphatjuk a legerősebb megkötést, amit kombinálva a tranzitgörbékkel becsülhető tömeggel, kísérleti eljáráshoz jutunk az exoholdak sűrűségének meghatározására.

A többszörös bolygórendszerek megfigyelésével lehetőségünk van, hogy a kölcsönös perturbációk eredményeképpen meghatározzuk a bolygók tömegét illetve pályahajlásukat. A radiális sebesség-görbék pontos vizsgálata felfedheti ezeket a bolygó-bolygó kölcsönhatásokat és ezáltal pontosabb képet kaphatunk az adott bolygórendszerről. Mint az általános adatmodellezési problémáknál, itt is az ismeretlen paraméterek egy halmazát kell illeszteni az adatsorra. Az egyes illesztési módszerek illetve hibabecslő eljárások megkövetelik hogy a modellfüggvény ezen paraméterek szerinti deriváltjait ismerjük. A meghatározott összefüggések segítségével megvizsgálták néhány konkrét, két bolygóval rendelkező rendszert. A radiális sebességeken felül meghatározták a baricentrikus koordináták és az egyes valós térbeli sebességértékekre vonatkozó hasonló összefüggéseket is. Ezek az összefüggések elősegítik a radiális sebességen alapuló asztrometriai és fedési fotometriai mérések párhuzamos vizsgálatát.

Ismert fedési exobolygók átvonulásait mérték a Pizskéstetői Observatórium műszereivel, összesen 85 éjszakán. Az adatok feldolgozását néhány speciális rendszerrel kezdték, pl. a HAT-P-13 rendszerével, amelyben a második bolygónak április végére volt előre jelezve a lehetséges tranzitja. Nemzetközi kampányt szerveztek a minél teljesebb lefedettségért. A null-detektálásból a fedési jelet kizárták, illetve szimulációkkal konfidencia-szintet rendeltek a kizáró következtetéshez.

Naprendszer égitestjei

A Spitzer-űrteleszkóp termális infravörös tartományban készített megfigyelési anyagának feldolgozását végezték az üstökösök méretének, albedójának meghatározása céljából. Ebben a programban a Jupiter-családhoz tartozó 100 üstököst vizsgáltak a Spitzerrel közepes infravörösben és nagy földi teleszkópokkal a látható fény tartományában. Ez a ma ismert Jupiter-család üstököseinek mintegy 25%-a, vagyis az eddigi legnagyobb ilyen megfigyelési anyag. A Spitzer által megfigyelt üstökösök magjának infravörös fluxusát határozták meg a magot körülvevő aktív porkóma jelenléte mellett és meghatározták a magok méretét is. Az infravörös megfigyeléseket érdemes volt kiegészíteni a látható fényben végzett megfigyelésekkel is két okból: i) így a mag mérete és albedója függetlenül meghatározható,

ii) a földi teleszkópokkal idősor megfigyelése is lehetséges, amelyből a mag alakja és tengely körüli forgás ideje meghatározható.

A "TNOs are Cool" Herschel Open Time Key Program célja, hogy fizikai és termális tulajdonságokat származtasson egy kentaurokból és Neptunuszon túli égitestekből (rezonáns, klasszikus, "leválasztódott" és szórt-korong objektumok) álló nagy mintára. Ebben a vizsgálatban hét objektumot tanulmányoztak, amiket a Herschel/PACS pontforrás-, vagy „mini-szken térkép” módjában észleltek. Ezeket a méréseket három esetben kiegészítették a Spitzer/MIPS mérésekkel is. Az égitestek mérete 100 és 1000 km között változik, öt égitestnek alacsony a geometriai albedója (10% alatt), a (145480) 2005 TB190 albedója 15% felett van. A klasszikus termális modellek – amelyekben vagy közepes „beaming” paramétert használtak, vagy a színváltozáshoz illesztették ezt – jól egyeznek a több színben készült mérésekkel. A bonyolultabb modellek is hasonló átméreteket és albedókat adtak, a kapott hőtehetetlenségek pedig a $0-25 \text{ J m}^{-2} \text{ s}^{-0.5} \text{ K}^{-1}$ tartományban változtak. Ez konzisztens a nagy naptávolságoknál várt alacsony hővezetési képességekkel. A projekt keretében összesen mintegy 140 objektumra fognak hasonló tulajdonságokat származtatni, ami segít majd megérteni a Naprendszer törmelék korongját, és így más rendszerek törmelék korongjait is.

A 2010 őszén indult Pizskéstető Supernova and Trojan Asteroid (PISTA) Survey keretében 481 kisbolygó felfedezését ismerte el ideiglenes jelöléssel a Minor Planet Center, valamint felfedeztek egy távoli, nagy luminozitású szupernóvát (SN 2010jk) is.

Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások

Gamma-kitörések: Megmutatták, hogy az általuk korábban talált közepes időtartamú gammakitörések (GRB-k) kevesebb energiát szabadítanak fel, és utófényük is halványabb, mint a hosszúaké, különösen ha a röntgen tartományban mérhető utófényeket vizsgáljuk, amelyek egy nagyságrenddel halványabbak, mint a hosszúaké. Hasonló tendencia látható a vöröseltolódások eloszlásában is, amely alapján a közepes GRB-k közelebb vannak hozzánk, mint a hosszúak. A vizsgálatok szerint a közepesek fizikai tulajdonságai különböznek a rövidekéitől, de eltekintve a kisebb fényességtől, hasonlóak a hosszúakéihoz. Kutatóik véleménye szerint a közepesek és a hosszúak szülőobjektuma azonos, és a különbség mindössze annyi, hogy a kitörés során ledobott héjak a közepeseknél vékonyabbak, mint a hosszúaknál.

Csillagásztörténet: Befejezték a Pécsi Egyetemi Beszédek csillagászati tartalmának előzetes vizsgálatát. Néhányuk meglepően sok csillagászati utalást tartalmaz. Ezek a kor szintjének megfelelő csillagászati tudást mutatnak. A Beszédek szerzője ismerte Arisztotelész filozófiáját, és általában azt követte. A csillagászati hivatkozások eredeti forrását is igyekeztek megkeresni, ami egy-két eset kivételével sikerült. Igazolták azt a korábbi sejtést, hogy a Beszédekben cremonai Gellért régi *De Caelo* fordítását használták. Magyarországi Kopernikusz *De revolutionibus* példányok sorsát igyekeztek nyomon követni. Felhívták a figyelmet eddig ismeretlen négy példányra. Megjelent Csillagászat és kultúra című gyűjteményes kötetük.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A csillagászat azon kevés természettudományok egyike, amelyre a szélesebb közvélemény is figyel. Eredményei rendre megjelennek az írott és elektronikus sajtóban. Az érdeklődés fenntartásában, az új eredmények szélesebb megismertetésében és a külföldi szakmai eredmények szakszerű tolmácsolásában az intézet kutatói tudatosan és nagy elkötelezettséggel vesznek részt. Csak néhány fontosabbat emelünk ki ebből a tevékenységből: a nagy sikerű

hirek.csillagaszat.hu hírportál gondozása (főszerkesztőként, állandó és alkalmi szerzőként), ismeretterjesztő előadások tartása évente százas nagyságrendben, riportok, interjúk adása a legkülönbözőbb sajtótermékeknek. Utóbbiakra az aktuális események – mint például a Kepler-űrtávcső legújabb (esetenként magyar) felfedezései, a kassai meteorithullás, vagy a Pizskéstetőn felfedezett szupernóva – adtak alkalmat. Az MTA Lendület-programját is komoly sajtóérdeklődés kíséri, ami az intézetben folyó Lendület-kutatásra, az exobolygók vizsgálatára is igaz. Az intézeti kutatásoknak a nagyközönséghez való közelebb vitelét szolgálják az évente kétszer megrendezett nyílt napok, de az is, hogy a Pizskéstetői Observatórium egész évben nyitva áll az érdeklődő csoportok előtt. A látogatások nemzetközi színvonalú lebonyolításához látogatócentrumok kialakítására lesz szükség mind Budapesten, mind Pizskéstetőn. Ezek tervezése, az igények és lehetőségek felmérése megkezdődött. Népszerű volt a *Határ a csillagos ég* című pályázatuk, amellyel a középiskolás korosztályt célozták meg. A nyertes az egyik mátrai távcsövön észlelhette kedvenc objektumát. Folyamatosan tudatosítják a közvéleményben és a döntéshozókban a fényszennyezés gazdasági, környezeti, kulturális kártételeit. Esetenként speciális szaktudást igénylő szakértői feladatokat is vállalnak (pl. közlekedési baleset kivizsgálásánál).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai: A beszámolási időszakban a *NEKIFUT stratégiai jelentőségű kutatási infrastruktúra-hálózata keretében* új intézményi kapcsolatokat alakítottak ki hazai csillagászati kutatóhelyekkel (SZTE Observatóriuma, Bajai Observatórium, ELTE szombathelyi Gothard Observatóriuma). Az Óbudai Egyetem Informatikai Karával felsőléggör-kutatási együttműködés kezdődött. A Collegium Budapest munkájában vendégkutatóként vettek részt. A Kepler-űrtávcső KASC konzorciumához kapcsolódó közös munka indult a BKMÖ Bajai Observatóriumának és az ELTE Gothard Observatóriumának munkatársaival.

Az intézet kutatói a beszámolási időszakban is részt vettek az egyetemi oktatásban graduális és doktori képzésben meghirdetett előadásokkal, gyakorlatok tartásával, valamint szakdolgozati és doktori témavezetéssel. Az alábbi előadásokat, illetve gyakorlatokat tartották: ELTE-n *előadás:* A csillagok világa, Csillagaktivitás – aktív csillagok I-II., Observációs csillagászat: változócsillagászat, Asztrostatisztika I-II, Planetológia I-II, A napfizika legújabb eredményei, Galaktikus csillagászat, Csillaglégkörök fizikája, A tudományos közlés művészete. *Gyakorlat:* Mérési gyakorlat IV. éves fizikus hallgatók számára. DE-n *előadás:* Zenei akusztika, SZTE-n *előadás:* Digitális képrögzítés I-II.

Nemzetközi: A hosszabb ideje meglévő és folyamatosan gyümölcsöző nemzetközi együttműködések túl 2010-ben elindult két új, űrtávcsövekhez kapcsolódó és az EU FP7 keretprogramja által támogatott projekt. Az egyik az IRSES (International Research Staff Exchange Scheme), amely a Kepler-űrtávcső csillagpulzációt vizsgáló KASC konzorciumához kapcsolódik, míg a Cesar (Cryogenic Electronics for Space Applications and Research), amelyben a Saclay asztrofizikai intézettel működnek együtt, az ESA jövő űrtávcsöveinek kifejlesztéséhez járul hozzá. Az ESA által tervezett új generációs exobolygó-kutató űrtávcső, a PLATO konzorciumi tagjai lettek. Szoros kutatási együttműködés alakult ki a University of Sydney-vel.

2010-ben is számos esetben sikerült elnyerni észlelési időt csillagászati nagyműszerekre nemzetközi együttműködésben pl. a NASA Spitzer infravörös űrtávcső, VLT (ESO, Chile). A benyújtandó pályázatok közös kidolgozásában együttműködtek a MPIA Heidelberggel, STScI Baltimore-ral. Szoros együttműködés volt a Harvard Smithsonian Center for

Astrophysics intézettel (HATNet) az exobolygók kutatásában. Rendszeres megfigyeléseket végeztek a Teide Observatóriumban az EU FP7 Opticon programja támogatásával.

Rendezvények, mobilitás: Az év során több jelentős nemzetközi találkozót és konferenciát is szerveztek az intézet kutatói: "TNOs are Cool!" Herschel Open Time Key Program Data Reduction Workshop (febr. 16-18., Budapest), A&A Executive Committee és A&A Board Meeting (máj. 7-8., Budapest), Dust from the ISM to Rocky Planets (aug. 28., Budapest), SOTERIA 2nd General Meeting, (okt. 4-7., Debrecen), és Herschel-űrtávcső PACS műszeréhez kapcsolódó 36. ICC (Instrument Control Centre) Workshop (okt. 7-8., Budapest). Az intézet kutatói több hosszabb tanulmányutat tettek az ESO központjában (Garching, Németo.), a University of Texas-on (Austin, USA), az MPI für Astronomie-ban (Heidelberg, Németo.) és Laboratoire d'Astrophysique-ban (Marseille, Franciaó.). Vendégkutatókat fogadtak Finnországból, Japánból és Bulgáriából.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az év során három nemzetközi pályázat volt sikeres. A korábban említett IRSES (2011-2014, 14 700 euró) és Cesar (2010-2013, 30 970 euró/év) projekteket az EU FP7-es keretprogramja támogatja. Sikerral pályáztak a CoRoT-űrtávcsővel végzett munka meghosszabbítására is az ESA PECS keretére (2011-2013, 25 000 euró/év). A *Többszörös exobolygórendszerek szerkezete és fejlődése*, OTKA-NKTH Mobilitás Reintegrációs (C típusú) pályázatuk is sikerral járt (2010-2013, 89,1 MFt). 2010-ben elindult három új OTKA pályázat és az év során egy újabbat nyertek el a Kepler-űrtávcső KASC konzorciumában végzett munkához (2011-2015, 39,438 MFt). Elindult egy francia-magyar TÉT együttműködés is.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szabó R, Kolláth Z, Molnár L, Kolenberg K, Kurtz DW, Bryson ST, Benkő JM, et al. (+ 10 társszerző), Nuspl J: Does Kepler unveil the mystery of the Blazhko effect? First detection of period doubling in Kepler Blazhko RR Lyrae stars. Monthly Notices R.A.S., 409: 1244-1252 (2010)
2. Poretti E, Paparó M, Deleuil M, Chadid M, Kolenberg K, Szabó R, Benkő JM, et al. (+ 9 társszerző): CoRoT light curves of RR Lyrae stars. CoRoT 101128793: long-term changes in the Blazhko effect and excitation of additional modes. Astron. & Astroph., 520: A108 (2010)
3. Oláh K, Korhonen H, Vida K, Ilyin I, Dall TH, Järvinen SP, Jurcsik J, et al. (+ 3 társszerző), Moór A, (+ 5 társszerző): Young solar type active stars: the TYC 2627-638-1 system. Astron. & Astroph., 515: A81 (2010)
4. Lane RR, Kiss LL, Lewis GF, Ibata RA, Siebert A, Bedding TR, Székely P, Balog Z, Szabó MGy: Halo Globular Clusters Observed with AAOmega: Dark Matter Content, Metallicity and Tidal Heating. Monthly Notices R.A.S., 406: 2732-2742 (2010)
5. Győri L: Precise Determination of the Orientation of the Solar Image. Solar Physics, 267: 445 (2010)
6. Kovács G, Bakos GÁ, Hartman J, Torres G, Noyes R, Latham DW, et al. (+ 13 társszerző): HAT-P-15b: A 10.9 Day Extrasolar Planet Transiting a Solar-type Star. Astroph. J. 724: 866-877 (2010)

7. Pál A: Analysis of radial velocity variations in multiple planetary systems. Monthly Notices R.A.S., 409: 975-984 (2010)
8. Regály Zs, Sándor Zs, Dullemond CP, van Boekel R: Detectability of giant planets in protoplanetary disks by CO emission lines. Astron. & Astroph., 523: A69 (2010)
9. Simon AE, Szabó MGy, Szatmáry K, Kiss LL: Methods for exomoon characterisation: combining transit photometry and the Rossiter-McLaughlin effect. Monthly Notices R.A.S., 406: 2038-2046 (2010)
10. Lellouch E, Kiss Cs, Santos-Sanz P, Müller TG, Fornasier S, Groussin O, et al. (+ 30 társszerző): 'TNOs are cool': A survey of the trans-Neptunian region. II. The thermal lightcurve of (136108) Haumea. Astron. & Astroph., 518: L147 (2010)
11. Horváth I, Bagoly Z, Balázs LG, de Ugarte Postigo A, Veres P, Mészáros A: Detailed Classification of Swift's Gamma-ray Bursts. Astroph. J., 713: 552-557 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	79	Ebből kutató ² :	38
PhD, kandidátus:	11	MTA doktora:	12
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			10

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			253
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			201
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	8	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 118
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 63
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	10	idegen nyelven: 1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	274,53	Összes független hivatkozás száma:	1112
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1112		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	1
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			47
		posztterek száma:	32
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	13	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			10
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	13	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		287,83	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	4	Teljes saját bevétel:	78,74 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			6
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	31,17	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	4,58	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			5
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	15,48 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	54,58 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		4,11	MFt

MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33., 1525 Budapest, Pf. 49.

telefon: 1-392 2225; fax: 1-392 2226

e-mail: barsony@mfa.kfki.hu; honlap: www.mfa.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A beszámolási időszak nem várt gazdasági nehézségeket, likviditási gondokat és a bürokrácia további növekedését hozta 2010-ben. Hála a korábbi pályázatoknak, a megfinanszírt gazdálkodásnak, az MTA MFA éves bevételeiben „csak” viszonylag még elviselhető, mintegy 200 M Ft-os csökkenést könyvelhetett el.

Az 5000m²-nyi területen működő intézet számára a legnagyobb kiadást továbbra is a nagy kutatási infrastruktúra működtetése, karbantartása és fejlesztése jelenti, beleértve a tiszta munkatereteket és nagy analitikai laboratóriumokat. A minőségbiztosítási rendszer jó működése eredményeképp négy laboratóriumuk került Stratégiai Kutatási Infrastruktúra besorolással az országos regiszterbe. Közülük az ellipszometriai laboratórium 2010-ben Akkreditált Vizsgáló Laboratórium besorolást is kapott. Az alapfeladatok ellátásához szükséges működési költségek és a folyamatosan csökkenő központi támogatás különbsége a megkötött szerződések szerinti, de ki nem fizetett NKTH pályázati pénzek elmaradása miatti hiány már meghaladja a 400 MFt-ot! Az infrastruktúra működtetése egyre megoldhatatlanabb feladatot ró a műszaki gárdára. A kifizetések elmaradása miatt szinte valamennyi szerződésben határidő-módosításokat kell kezdeményezni, ami felesleges adminisztratív terhet és többlet bürokráciát jelent. A „hadi gazdálkodás” a kiadásokat márciustól-novemberig az elviselhető abszolút minimumra szorította.

Az MFA szervezeti felállása 2010-ben nem változott, az intézet továbbra is hat tudományos osztállyal működött. Az intézet számít a jóváhagyott 20 fős (15 tudományos + 5 kutatótámogató) státusznyi növekedésre, ami az MTA Q2-be kihelyezett MFA Multidiszciplináris Kutatócsoport működését biztosítja majd. A választott négy fő kutatási iránnyal, (vékonyréteg, nanotechnológia, fotonika és mikrotechnológia) meghatározott stratégia, a multidiszciplináris kutatási irány mindenképpen követendőnek, és sikeresnek bizonyult. Az MFA eredményei a tudományometriai mutatókon túl a benyújtott szabadalmakban, PhD képzési és egyéb oktatási támogatásban, a tudományos eredmények ipari hasznosításában, tanácsadásban komplex módon testesülnek meg.

2010-ben tíz EU FP7-es pályázatuk fut (beleértve egy 2008-ban elnyert ENIAC JTI pályázatot). Az ENIAC 2. pályázati fordulóban 2009. során nyertes pályázatuk (CAJAL4) szerződéskötésére az NKTH korábbi nemzetközi kötelezettségvállalása ellenére eddig nem került sor, a részvétel támogatás nélkül, önerőből alacsony szinten folyt. Az év folyamán hat PhD fokozatot szereztek munkatársaik. Jelenleg tíz posztdoktoruk dolgozik külföldön vezető intézményekben, ami a statisztikai átlaglétszámot magyarázza a beszámolóban. Pillanatnyilag ezt a helyzetet szerencsésnek is kell értékelniük.

Két új labor, köztük az MTA - KAIST együttműködés keretében létrejött Koreai-Magyar Nanotudományi Közös Laboratórium és négy dolgozószoba kialakításával javították a munkakörülményeket.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatás 2010-ben is 6 osztályvezető irányításával, önálló témagazdálkodású kutatócsoport, ill. laboratórium kereteiben folyt. *A beszámoló követi a szervezeti sémát.*

Nanoszerkezetek Osztály (13 fő, 7 kutató, 6 PhD hallgató)

Az osztály tudományos tevékenységének fókuszában a különféle nanoarchitektúrák (egyedi nanoszerkezetekből felépülő nanorendszerek) létrehozása és jellemzése áll. Ezen belül a szén nanoszerkezetek kutatása – különös hangsúllyal a grafén (egyetlen atom vastag grafit) alapú nanoszerkezetek és nanoarchitektúrák előállítására és vizsgálata - valamint a természetes fotonikus kristályok kutatása és a bioinspirált mesterséges fotonikus nanoszerkezetek előállítása a kiemelkedő témák. Az osztály különféle, nanométeres felbontású, nem konvencionális litográfiai módszereket is fejleszt nanoszerkezetek és nanoarchitektúrák létrehozásának céljával.

A grafénkutatás és a szén nanoszerkezetek témakörében elért eredményeik:

- Grafén nano-építőelemeket alakítottak ki cikk-cakk szélekkel SiO_2 -n.
- Elsőként igazolták kísérletileg, hogy a grafénba márt kerek (vegyesen cikk-cakk és karosszék élek) és a szabályos, hatszögletes, tisztán cikk-cakk szélű nanolyukakból kialakított mintázatok Raman spektruma különbözik (a szerkezeti hibákra utaló D csúcs hiányzik a hexagonálisra márt nanolyuk esetében).
- Összehasonlították egyedi egyfalú és többfalú szén nanocsövek gázérzékelő tulajdonságait ugyanazon anyagok véletlenszerűen eloszló “szőnyegek” tulajdonságaival. Megállapították, hogy a nanocső-szőnyegek válaszjelét a csövek közötti átvezetés befolyásolja meghatározó mértékben.
- Grafén töltésterjedésében két tartományt különböztettek meg. Az elsőben a szén-szén kötések mentén zajló molekuláris terjedés dominál, míg a másodikban a cikk-cakk irányok mentén történő terjedés preferált, ebben a szakaszban a szilárdtestre jellemző viselkedés a domináns.
- Sikeres kísérleteket hajtottak végre elektronsugaras litográfiát kombinálva a grafén carbotermikus marásával. Ennek eredményeként megnyílhat az út az atomi pontosságú grafén megmunkálás és az elektronsugaras litográfia lehetőségeinek ötvözésére.

Természetes eredetű fotonikus kristályok és más optikailag aktív nanoszerkezetek kutatása terén az évben elért új eredmények:

- Megmutatták, hogy különböző lepidoptera szárnyak színének változása vízgőz kondenzáció hatására a fotonikus nanoszerkezetekkel rendelkező szárnyak azonosítását teszi lehetővé. A felismerés a display technológiák terén lehetséges alkalmazást rejt magában.
- FIB megmunkálással és ellenőrzött oxidációval bioinspirált fotonikus szerkezeteket készíttettek grafitból.
- Kísérleti adatokat a modellezési eredményekkel összevetve megmagyarázták az ezüst színű lepke (*Argyrophorus argenteus*) vizuális tulajdonságait.
- Új módszert és eszközt dolgoztak ki a múzeumi lepke példányok szárnyai fényvisszaverésének reprodukálható mérésére anélkül, hogy ehhez szükséges lenne a példányok roncsolása (szárnyak eltávolítása). Statisztikailag releváns számú egyeden

végzett mérésekkel megmutatták, hogy a vizsgált boglárkalepke fajok hímjeinek színe faj-specifikus és alkalmas lehet a fajok beazonosítására.

Komplex Rendszerek Osztály (8 fő, 7 kutató)

Az osztály feladata kettős: komplex rendszerek kutatása a statisztikus fizika felhasználásával evolúciós játékelméleti modellekben, nemegyensúlyi rendszerekben, önszervező mintázatok kialakulásában és a népdalkincs szerkezeti analízisében, valamint a kép- és jelfeldolgozás multidiszciplináris alkalmazásainak fejlesztése. Fontosabb új eredményeik:

- Létrehoztak egy 4 TFlop kapacitású számítógép egységet grafikus processzorokkal. Tanulmányozták, hogy a különböző szoftverfejlesztési támogatások kihasználásával milyen mértékben növelhető a szimulációk sebessége.
- Monte Carlo szimulációkkal tanulmányozták a felületi mintázatok kialakulását olyan rendszerekben, ahol az atomok rendeződését irányított külső hatás befolyásolja. A Griffiths-fázis kialakulását is vizsgálták numerikusan a fertőzés terjedésére kidolgozott modell keretein belül “kis-világ” hálózaton.
- Új evolúciós játékelméleti munkákba kezdtek, melyben a játékosok kis csoportjai koordinált módon új stratégiát választanak, hogy a csoport nyereségét maximalizálják. Folytatták a közösségi érdek érvényesítését szolgáló különböző büntetési eljárások hatékonyságának szisztematikus tanulmányozását is.
- Vizsgálták azokat az eseteket, amikor a játékosok haszon függvénye a saját kifizetéseiből és a társ-játékos kifizetéséből áll Q és $(1-Q)$ faktorokkal súlyozva. Modelljük világosan megmutatta, hogy optimális kifizetés a testvéries játékosokkal érhető el, akik a közös jövedelmüket egyenlően osztják meg ($Q=1/2$). A testvériességtől való eltérés a rendszert a közjó tragédiájához vezetheti mind az önző ($Q=0$), mind az önzetlen ($Q=1$) játékosok esetében.
- Tanulmányozták a dinamikus gráfok koncepcióját és a valószínűségi áramokat azon élek mentén, amelyek olyan állapotokat kötnek össze, amelyek egymásba transzformálhatók nemegyensúlyi kétállapotú rácsok elemi folyamatainak keresztül. Meghatározták a fajlagos entrópia termelődését egy egyszerű modellben a gyenge mutáció határesetben.
- A népzenei dallamok jellegzetességeinek azonosítására illetve a népek dallamkészletének hasonlóságát és különbözőségét kimutató algoritmusait továbbfejlesztették a nyelvek és genetikai adatok elemzésére. Ez a kombinált eljárás lehetővé teszi a népek közötti kapcsolatok összetettebb elemzését.
- Az osztály mérnökei új képelemző szoftvert fejlesztettek ki és a megfelelő hardvert összeállítva (nagyfelbontású kamera, pontosság és reprodukálási teszt) javították a 3D mozgáskövető szoftver moduljukat. Ezt az Axon gyárban alkalmazták flexibilis kábelek gyártás közbeni kalibrációjára.

Vékonyréteg-fizika Osztály (25 fő, 13 kutató, 5 PhD hallgató)

Az osztály feladatai három, összefüggő csoportba sorolhatók: modell rendszereken derítik fel a fém, félvezető és szigetelő vékony-, és nano-rétegekben, nanokompozitokban lejátszódó szerkezetépítő folyamatokat; elektronszóródási, spektroszkópiai, diffrakciós- és ionos keveredési alapú kutatásokat művelnek, ipari alkalmazást ígérő kutatásokat folytatnak a kemény, súrlódáscsökkentő bevonatok, a fém nanorészecskék és nanokompozitok, félvezető eszközök és kontaktusok vizsgálatában.

- Új OTKA projektet kezdtek a Cu-Mn rendszer fázisainak tanulmányozására, melyhez kombinatorikus módszerrel készítenek mintasorozatot.

- Új módszert vezettek be a szemcsehatárok jellemzésére beleértve a határsík azonosítását is, melyet eredményesen alkalmaztak a High-EF EU FP7-es projektben multikristályos Si szemcsehatárok leírására. Ugyanebben a projektben sikeresen azonosították a Si-ban talált hibák fő forrását. A hibasűrűség jelentősen megnőtt a lézerrel kristályosított mag és a szilárdfázisban (kályhában) kristályosított abszorber réteg közt. Az atomi felbontású TEM képek a határfelületen helyenként egy amorf szennyezést tártak fel. A szisztematikus vizsgálatok elősegítették a két lépés közti tisztítás tökéletesítését és a hibasűrűség jelentősen csökkent.
- Mind a Cu-Ag, mind a TiN-AlN rendszerben spinodális szétválást figyeltek meg, mint szerkezet-kialakulás vékonyrétegekben eddig kísérletileg nem bizonyított mechanizmusát.
- Tanulmányozták a köbös és hexagonális (wurtzite) fázisok nyomástól függő stabilitását a TiN-AlN és CrN-AlN rendszerekben, elősegítve azon tartományok kiválasztását, melyekben az előnyös tulajdonságú köbös fázis alakul ki.
- A MORGAN FP7 projekt keretében GaN HEMT szerkezeteket beborító CVD gyémánt rétegeket vizsgáltak. Megállapították a polikristályos réteg jellemző szemcseméretét és azt, hogy a gyémánt növekedése egy SiC szemcséket tartalmazó 10-20 nm vastag amorf rétegen indul.
- A RODSOL FP7-es projektben Au katalízissal növesztett GaN nanoszálakat tanulmányoztak, melyek mind egykristályok és azonos orientációjúak. A GaN szálak diszlokáció-mentesek, de néhány rétegződési hiba előfordul bennük.
- A CORRAL FP7 projektben acélra és alumíniumra ALD-vel leválasztott néhány 10 nm-es korróziógátló rétegek szerkezetét tanulmányozták. A leválasztott alumíniumoxid rétegekről igazolták, hogy konform módon befedik a hordozó felületét. Az eredmények szerint a plazmával segített ALD-vel leválasztott rétegek jobbak, mint a termikus ALD-vel leválasztottak.
- Gönci klóropálban szilika és nontronite orientált összenövését tárták fel.
- Cr/Au és Ti/Au kontaktusokat készítettek GaN-hez. A Cr/Au kontaktusok 600°C-ig egyenirányítóak, aztán ohmossá válnak, ami egybeesik azzal, hogy magas hőmérsékleten a GaN-be benőtt Cr-ban gazdag szemcsék képződnek.
- Sc_{0.57}Al_{0.43}N(111) rétegeket hőkezelve azokban fázis szeparációt figyeltek meg és megadták az orientációs összefüggéseket.
- A METANANO (NKFP) projekt keretében (nemesfém alapú innovatív termékek) többféle módszerrel előállított arany részecskékből álló réteget állítottak elő és demonstrálták, hogy azok ellenállás-változása alkalmas egyes oldószer gőzök detektálására.
- NTPCRASH (NKFP) projekt keretében szénszállal erősített anyagokat tanulmányoztak. Meghatározták a súrlódási együtthatót és a kopást.
- Számos elemre (Si, Ni, Cu és Ag) meghatározták kísérletileg az elektron visszaszórást és a felületi gerjesztési paramétert.
- Molekuladinamikai szimulációkkal írták le Si ion-erózióját és nanotopográfiáját. Kiderült, hogy a 0,5 keV ionokkal (Xe) bombázott Si felülete nem sima, hanem 20 nm mélységig nanoméretű lyukak vannak benne.
- GaAs felületét alacsony energiájú Ar ionokkal bombázták, majd XPS mérésekkel meghatározták az arzén feldúsulás kvantitatív mértékét a felületen, illetve közvetlenül alatta az arzén hiány mértékét és mélységi eloszlását.
- A korábbi megfigyelésükről, mely szerint az ionbombázással elősegített Ni₃C réteg kialakulása a tiszta szén és nikkell rétegek közt, éles átmenetekkel jön létre kiderítették, hogy vakanciákkal segített szilárdfázisú folyamat.

Az intézet legnagyobb létszámú osztálya, amely a legnagyobb tisztaszobai infrastruktúrát üzemelteti. Feladatai integrált mikrorendszerek és fotovillamos szerkezetek kutatásához, előállításához és minősítéséhez kapcsolódnak, beleértve a nanoszerkezetek integrációját is. Az év folyamán indult új és futó legfontosabb kutatási projektek és eredményük:

- A MEMS eszközök területén született legfontosabb eredmények a 3-tengelyű erőméréshez kötődnek, a „Nanoelectronics for Safe, Fuel Efficient and Environment Friendly Automotive Solutions” – SE2A, ENIAC JTI projekt keretében. A mély reaktív ionmarással készült 162 μm vastag, négyzetes, ún. tele-membrános piezorezisztív erőmérő szerkezeten a modellezett érzékenységet 3%-on belül megközelítő értéket, 5,98 mV/V/N-t mértek. Megkezdték a jármű gumiabroncsba szánt eszközök terheléses (vibrációs) vizsgálatát (TNO) és a végleges szerelés kidolgozását (Boschman) holland partnerekkel.
- Különleges felületi morfológiai hatásakon alapuló biomimetikai szerkezeteket demonstráltak a kibővült 3D megmunkálási lehetőségekkel és polimer rétegek beiktatásával. A szilárdtest-folyadék-gáz határfelületi jelenségekkel módosították a felületek nedvesítési tulajdonságait, a szuperhidrofobitás illetve az EWOD (electrowetting on dielectrics, digitális mikrofluidika) alkalmazásokhoz.
- Funkcionális passzív mikrofluidikai struktúrák tervezését és kialakítását kezdték el szilícium 3D megmunkálásával és polimer technológiák (PDMS, SU8) alkalmazásával bioanalitikai célokra.
- A jelölésmentes biológiai érzékelés az intézet egyik kiemelt kutatási iránya. A kémiailag érzékenyített nanopórusok segítségével a CAJAL4 ENIAC JTI projekt keretében a transzport moduláción alapuló erősítés miatt egymolekulás érzékelés is lehetővé válik. Megkezdték a membránokon megvalósított nanopórusos rendszerhez illeszkedő mikrofluidikai rendszer kialakítását anodikus kötéssel, nemzetközi konzorciumban, holland partnerrel (Micronit).
- Sikeresen folytatták 3D szerkezetek degradációja ellen a kopásálló kemény, szilícium-nitrid, titán-nitrid bevonatok alkalmazását és minősítését (ld. Journal of Micromechanics and Microengineering címlap).
- A termopár-szenzor ill. a térbeli eloszlást detektálni képes hőérzékelő chip fejlesztése ipari kezdeményezésre indult két éve (Tateyama). A szerkezet és technológia optimalizálása (DeepRIE megmunkálás) során derült ki, hogy a levegő hővezetése a tok felé a hőeloszlás kialakulásában nem hanyagolható el. Bár megfelelő IR absorber réteg kialakítása eddig nem járt sikerrel, a töltéshordozó-abszorpció fokozásával várható további hatásfoknövelés.
- A Terahertzes forrás, érzékelő, és feldolgozó struktúrák kutatását a TERASTART NKTH-OTKA pályázat keretében folytatták. A membránon kialakított termooszlop alapú szenzor előnye, hogy a sugárzott teljesítményt közvetlenül alakítja feszültséggé. A termopárok egyben félhullám-alapú dipól antennák. Szimulációs eredmény alapján a rezonancia-optimalizációt nem a termopár-antenna méretezése, hanem a teljes chip méretei határozzák meg.
- A minimál-invazív, hajóorr alakú agyi elektróda technológiájuk továbbfejlesztésével (>50% kihozatal!) kidolgozták a 8 cm hosszú ún. mélyagyi elektróda konstrukcióját javított Pt-kontaktus fémezéssel.
- Nanogömb-litográfiával kombinált ionbesugárással Si és C szubsztrátban valósítottak meg speciális felületi morfológiát (tüskeszerű alakzatokat, nano-Petri csészét), és vizsgálták a képződési mechanizmusban szerepet játszó pl. termikus és elektrosztatikus alapjelenségeket a maszkoló szilika részecskék mérettartása és a morfológia kialakulása szempontjából.

- A NIR detektor eszközök fejlesztése nanorészecskéket tartalmazó nyomdafesték azonosításában iparilag gyártható berendezés kifejlesztésével zárult a (K+F szerződés).
- A MEMS technológiában használt szerkezeti és funkcionális anyagok termomechanikus minősítésére szolgáló mikrofűtőtest optimalizálását végezték el egy új, telemembrános teszt szerkezet bevezetésével.
- A metodikafejlesztésben kiemelendő a szeletkötés rutinszerű használatának K+F támogatása, az atomi rétegnövesztési technika bevezetése és alkalmazása számos területen. A mérés technikai módszerek fejlesztésében nagy előrelépés lesz a megkezdett eredeti megoldáson alapuló pásztázó tús kapacitás-spektroszkópia megvalósítása a DLTS spektroszkópia bázisán.
- A GaAs and InAs MBE nanoszerkezeteknél a droplet-epitaxiás kvantumpöttyök kialakulásában a gyűrűk növekedésének értelmezése jelentős új eredményük.
- A fotovillamos szerkezetek kutatásában a technikai problémák miatt egy évvel meghosszabbított nagy OTKA projekt keretében folytatták az együtt párologtatott CIGS abszorber-réteg kutatását. Továbbra is megoldatlan a párologtató források optimalizálása az ipari partnernél, ezért a munka súlypontja a TCO rétegekre tevődött át, különös tekintettel az alacsony hőmérsékletű ALD módszer alkalmazására a ZnO rétegek in situ Al adalékolására.
- A TFSOLAR NKFP projekt keretében a BudaSolar cég irányította konzorciumban az év elején átadott Si-vékonyréteg napelem technológiai CVD laborban megfelelően kombinált RF plazmás CVD-vel leválasztott amorf abszorber rétegben alakítottak ki mikrokristályos Si szemcséket, ami a hatásfok jelentős növelésével kecsegtet.
- A tiszta-labor infrastruktúrában a legnagyobb előrelépést 2010-ben az Oxford Instruments PlasmaLab 100 típusú berendezésük üzembeállítását jelentette. Ezzel valamennyi, korábban pórusos Si mikrogépészettel készült szerkezet átállítása megvalósulhat foundry-kompatibilis technológiai kivitelűre.
- Az év folyamán egy szabadalmat kaptak meg (Lajstromszám: 227 149, Elfogadási dátum: 2010. 02. 24.).

Fotonika Osztály (25fő, 17 kutató, 4 PhD hallgató, 5 MSc hallgató)

Az osztály feladata roncsolásmentes vizsgálati módszerek kutatása és fejlesztése optikai (ellipszometria és Makyoh-topográfia), valamint mágneses (hiszterézis) elven, félvezető fotonikai szerkezetek és integrált optikai érzékelők, és jelzésmentes bioérzékelés kutatása optikai kiolvasással. Főbb kutatási projektek és eredmények 2010-ben:

- A NANOMAGDYE FP7 “Orvosi célra alkalmazott nanoméretű mágneses részecskék detektálása” projekt keretében megtervezték és megépítették a továbbfejlesztett szuper-érzékeny mágneses szonda vezérlő modulját. A műtéti alkalmazásban 7 mm távolságból detektáltak mágneses nanorészecskéket diagnosztikai céllal, az EU-s értékelés szerint ez a szonda a projekt leginnovatívabb eredménye!
- Az eltérő lehűtési profilú öntöttvas mintákon (ductile cast iron) roncsolásmentes mágneses mérésekkel OTKA kutatás keretében nyomon követték az anyagszerkezet változását. Kimutatták, hogy – ellentétben a hagyományosan alkalmazott örvényáramú mérésekkel - módszerükkel a hőmérséklettől függetlenül korrelálthatók a mágneses jellemzők a keménységgel és az elektromos vezetőképességgel.
- A ferromágneses anyagokban (pl. reaktor csővezetékek falában) kialakuló lokális falvékonyodás kimutatása, különösen, ha egy idegen lerakódás takarja a vizsgálandó területet, a jelenleg létező módszerekkel megoldatlan. Roncsolásmentes mágneses

módszerüknek így jó esélye van a gyakorlati bevezetésre japán-magyar együttműködésben.

- Tovább folyt a Makyoh topográfia alkalmazása az ANNA FP6 projekt és a MORGAN FP7 projekt keretében. Olasz partnereknél növesztett SiC/Si heteroszerkezetek deformációjának a tanulmányozására a hordozó orientáció és az előkészítés függvényében, valamint nagyfelületű Si szeletek nagyléptékű termomechanikus deformációjának meghatározására (ANNA); gyémánt/Si, AlN/Si és GaN/AlGaIn/AlN/Si minták morfológiájának meghatározására (MORGAN). A metodikai fejlesztés (OTKA) a nem tiszta szinuszos és kváziperiodikus felületek esetére kimutatta, hogy a Fourier-reprezentáció és a lineáris megközelítés a megadott félkvantitatív kritérium betartásával a Makyoh-topográfias leképezés nemlineáris jellege ellenére alkalmazható.
- Több lezárult, futó és új OTKA támogatással folyik a kisenergiájú ionimplantáció hatásának ellipszometriás vizsgálata, a szinkrotronos ellipszometria nagy foton energián, polikristályos, nanokristályos és fotonikus szerkezetek modellezése, összetett, polimertartalmú felületi nanostruktúrák szerkezetvizsgálata, óriás mágneses ellenállású (GMR) elektrolitikus multirétegek minősítése.
- Új OTKA támogatott ígéretes kutatási irányként a fehérje vékonyrétegek felületi adszorpcióját tanulmányozták különféle feltételek mellett (ionerősség, pH, szubsztrát hidrofobicitás stb.) in situ ellipszometriai méréssel, valamint komplementer módszerek egyidejű kombinálásával, a speciális ellipszométer – rács-csatolt interferométer mérő-összeállításukkal.
- 3,5 MeV-es energiájú N implantációval tellurüvegben 1,55 μm -en (távközlési hullámhossz) is sikerült hullámvezetést kimutatni, valamint hullámvezető alkalmazásra CaF_2 , $\text{Bi}_4(\text{GeO}_4)_3$ és $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ (BGO) kristályokban is implantáció hatására törésmutató változást generálni (olasz és SZFKI együttműködés).
- NKFP-s projektek keretében ion implantált szeletek ellipszometriás minősítése (ICMET), a vékonyréteg napelemtechnológiákhoz ellipszometriás kiértékelési módszerek fejlesztése (PVMET08) és a módszereknek amorf ill. mikrokristályos szilícium valamint az átlátszó-vezető oxid rétegek minősítésére való alkalmazása (TFSOLAR2) folyik.
- Rács-csatolt hibrid hullámvezető interferometria (mozgó alkatrész nélkül) megvalósítása: A svájci Creoptix cég szabadalmának megvalósíthatóságára hibrid hullámvezető interferométert fejlesztenek nagy érzékenységgű, optikai kiolvasású érzékelőként történő felhasználásra. A publikált MFA kísérletek eredménye szerint a műszer érzékenysége már jobb mint 10⁻⁶.
- Optikai hullámvezetővel fehérjék, nanorészecskék és emberi embrionális őssejtek felületi viselkedésének OWLS (Optical Waveguide Lightmode Spectroscopy) monitorozását és a változások kinetikai modellezését folytatták.
- A FP7 P3SENS “Polymer photonic multi-parametric biochemical sensor for point of care diagnostics” projekt keretében kis mennyiségű vérminták vizsgálatához alkalmas küvettarendszert dolgoztak ki és tanulmányozták a TiO_2 -vel bevont OWLS chippek karakterisztikáját, és PDMS mester használatával újszerű UV-re keményedő műanyagok nanoimprintálhatóságát tesztelték.
- Sikeresen állítottak elő arany/szilika mag/héj típusú nanorészecskéket 15-35 nm hosszú arany nanorudakból kiindulva kb. 10-15 nm vastag mezopórusos szilika kéreggel. A részecskék szolját TEM mérésekkel, a részecskék méreteloszlását és zéta-potenciálját DLS mérésekkel vizsgálták. A core-shell részecskékből közvetlenül és hidrofobizálás után közel egy részecske vastagságú vízfelszíni, szilícium- és üveglapra is átvihető Langmuir-Blodgett filmeket készítettek, és minősítettek.

- Kimutatták, hogy a porlasztott Si/Ge rétegek hidrogéntartalmának meghatározása önmagában optikai mérésekkel is lehetséges, azaz egy gyártási folyamat (pl. napelemgyártás) során a drága ERDA analízis in situ optikai méréssel kiváltható.
- LED-es fényforrások fotobiológiai vizsgálatát végezték el a kereskedelemben elérhető Si alapú spektrális besugárzás/sugársűrűségmérőkkel optikai vágó szűrők segítségével téve mérhetővé a közeli IR tartományt - kiemelve a spektrális csúcsok lábait a zajból.

Az év során egy hazai szabadalmukat fogadták el: „*Mérési elrendezés és eljárás folyadékfelszínen úszó szennyeződések kimutatására, elsősorban monitoring kutakhoz.*” 2010. aug. 30.

Az FP6 ANNA projekt teljesítéseként az MFA *Ellipszometria Labor*t a Nemzeti Akkreditációs Testület az év elején kiváló minősítéssel Vizsgáló Laboratórium néven akkreditálta.

A Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karral közösen üzemeltetett *Bioszenzorikai Laboratórium* felszerelése 2010-ben befejeződött.

Az 5. Nemzetközi Spektroszkópai Ellipszometriai konferencián, Albany-ban (USA) kiemelten vettek részt (1 meghívott szóbeli, 1 szóbeli és 8 poszter), szekció elnökséget, tanácsadó testületi és programbizottsági tagságot kaptak.

Kerámiák és Nanokompozitok Osztály (16 fő, 8 kutató, 4 PhD hallgató, 7 MSc hallgató)

Az osztály feladata a kiterjedt nano-preparációs és kerámia-technológiai lehetőségekkel új tulajdonságú szerkezetek, kompozitok létrehozatala és vizsgálata, különös tekintettel a méreteffektusok nyújtotta előnyök kiaknázására.

- Szén nanofázissal készült kompozit szilíciumnitrid kerámiák (OTKA) SPS (szikra-plazma szintereléses) módszerrel keményebbek és ridegebbek, míg a HIP-pel (magashőmérsékletű izosztatikus nyomásos szinterelés) szívósabbak. Létezik egy optimális őrlési idő a nanocsövek hatékonyabb diszperziója és a mérsékelt szerkezeti roncsolódás szempontjából.
- Grafit nanorétegeket állítottak elő őrléssel kerámia kompozit alkalmazások számára, a kis rétegszámú nano-grafitlemezekből álló nanopor olcsón, reprodukálhatóan, relatív nagy mennyiségben készül.
- Természetes alapanyagokból (főleg tojáshéj) szintetizált és elektromos fonással készült Nano-hidroxiapatit (nHAp)-biopolimer technológiáját optimalizálták a nanoszálak méretének és az nHA eloszlásának szabályozásával és együttműködésekben folytatták (Hallym, SOTE) az in-vitro és in-vivo csontosodási tesztek (OTKA, TÉT).
- Sikeresen állítottak elő volfrámoxiddal adalékolt polimer szálakat az elektro-fonás technológiával, bizonyították, hogy a WO₃(2H₂O)-val adalékolt polimer oldatban a WO₃(2H₂O) szemcsék az eljárás során vizet veszítenek és a röntgendiffrakciós spektrumban WO₃(H₂O) csúcsok jelennek meg (OTKA).
- Új kutatási témájuk a diszpergált oxidkerámia szemcsékkel erősített nanoszerkezetű tömbi acélok fejlesztése pormetallurgiai lépések (intenzív őrlés és diszpergálás, szinterelés) bevonásával. A legnagyobb hatást a szerkezetre és morfológiára a vegyes őrlés biztosította, amivel mind az ausztenites, mind a martenzites minták nanoszerkezetűek.
- Nedves kémiai eljárással vékony, hosszú, egykristályos ZnO szálakat növesztettek porlasztott ZnO szubsztráton (OTKA pályázat) kompozit napelem ill. bioérzékelési céllal.

- Vertikális ZnO nanorudak elektronmikroszkópban, kalibrált AFM tű segítségével végzett szisztematikus in-situ hajlítós elektromechanikai tesztjének analitikus és végeelem szimulációs kiértékelése azt eredményezte, hogy a nanoszálak Young modulusa (32 GPa) lényegesen kisebb a tömbi anyagénál (140 GPa). A mérés során egy másik tüvel áramfeszültség karakterisztikát is sikerült regisztrálni a szál összenyomott vagy húzott oldala és a szubsztrát közt (OTKA).
- ZnO nanooszlopok térbeli elhelyezkedésének rendezettségét ill. annak szórását vizsgálták lézer diffrakcióval, bár a diffrakció hullámhosszfüggését a minták 3D fotonikus alkalmazásának céljából a csekély intenzitás miatt még nem tudták meghatározni.
- Rendezett ZnO nanoszálakat szintetizáltak öt különböző ZnO felületen: ZnO egykristály, zafír/PLD ZnO, Si/PLD ZnO, zafír/Pt/PLD ZnO, Si/porlasztott ZnO. A vertikális nanorudakon és a hordozókon elvégzett SEM, AFM, XRD és XPS vizsgálatok kimutatták, hogy a nanorúd tömbök minőségét elsősorban a magréteg kristályszerkezete és csak kisebb mértékben a felület durvasága határozza meg.
- A lassú és költséges elektronsugaras eljárás kiváltására kidolgoztak egy ún. nanogömb litográfián alapuló módszert, mellyel rendezett vertikális nanorudak hozhatók létre nagy felületen. A nanoszerkezetek optikai transzmisszióját FDTD módszerrel hasonlították össze (OTKA).
- Szervetlen félvezető nanoszerkezet / szerves félvezető heteroátmenetek előállításához különböző körülmények (magréteg, idő stb.) között növesztett ZnO nanoszál rétegek feltölthetőségét vizsgálták n-típusú félvezető polimerrel (poli(3-hexiltiofén, P3HT)), a legjobb kitöltést a klorobenzol vagy diklorobenzol eredményezte a P3HT oldoszeréként (TÉT).
- Nedves kémiai eljárással és elektromos fonás segítségével megoldották a függőleges nanoszálak mellett vízszintes ZnO szálak növesztését a nanoszerkezetek mikrorendszerekbe integrálásához. A króm elektródával megvalósított vízszintes ZnO nanoszálak szerkezet ohmos vezetést mutat, így alkalmas kémiai vagy biológiai érzékelésre (OTKA).

2010-ben ipari megrendelések alapján jelentősen bővült a hagyományos műszaki kerámia-termékek előállítása.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az MFA szakmai vezetésével működő *IMNTP - Integrált Mikro/Nanorendszerek Nemzeti Technológiai Platform* - 2010-ben zárta le a szakmai párbeszédet a hazai mikro- és nanoelektronikai és fotovillamos kutatás-fejlesztés stratégiáját illetően. A szektor *Stratégiai Kutatási Terve és a Megvalósítási Tanulmány* publikálása 2010. májusában megtörtént, az anyagok a <http://www.imntp.hu/index.php?pg=menu&id=41> címen található meg.

A Nanoszerkezetek Osztály 2003-tól folyamatosan üzemelteti és frissíti az eredményeiről magyar és angol nyelven is közérthető formában beszámoló honlapot (<http://www.nanotechnology.hu>). Az oldalt több mint 16000 látogató kereste fel. Angol nyelvű honlapjukon szabadon hozzáférhető egy saját fejlesztésű szimulációs programcsomag (*Web-Schrödinger 2.1*), amely a kvantummechanika egyes jelenségeit mutatja be vizuális formában. A program alkalmazható a gimnáziumi és az egyetemi oktatásban is. Hasonló oldalakat működtetnek a mikrotechnológiai és fotonikai terület munkatársai <http://www.MEMS.hu> és <http://www.ellipszometria.hu> címen. Több előadással vettek részt a *Kutatók éjszakája* rendezvényen is. A *Diákok az Akadémián* sorozatban tartottak előadást az MTA-n.

Az emberiség energetikai problémáinak fenntartható megoldásában a *napenergia hasznosítása* is fontos szerephez jut. 2010-ben két olyan EU projektben (HIGH-EF és RodSol) is részt vettek, melyek célja újfajta anyagokból és új elveken, javított hatásfokkal működő napelemek kifejlesztése. A témában 2011. 02. 24-én jelent meg róluk riport a Világ-gazdaság "Energia" mellékletében.

Előregedő társadalmunkban növekszik az igény előnyös tulajdonságú *biokompatibilis* anyagok felhasználására implantátumokban, amelyek több évtizedig működnek az élő szervezetben. Az MFA-ban a kutatott bioaktív nano-hidroxiapatit a kemény vagy lágy élőszövetbe könnyen beépülő csontszerű anyag.

Az intézet által hagyományosan megszervezett *MFA Nyári Iskola* minden évben 20-30 középiskolás számára biztosít egy hetes lehetőséget az aktuális tudományos kutatásba történő bekapcsolódásra. A lelkes résztvevő diákok tapasztalataikról több kéziratban számoltak be az Élet és Tudomány hasábjain.

Az *MFA Nyílt Napok* (tavaly 150-200 látogatóval) az érdeklődő adófizetőknek biztosítanak lehetőséget az intézet kutatómunkájába való betekintésre. TV műsorok felvételét forgatták 2010-ben a következő témákkal:

- Légekőri aeroszol részecskék kutatása
- Talajszennyezés: hogyan működnek az agyagásványok?
- Napelemek fajtái (egykristálytól a szálakig).
- Mikroerőméréstől a tapintásérzékelésig
- Ionsugaras mintapreparálás alapok
- Tudóskávézó – Beszélgetés a nanotechnológiáról

A *társadalomtudományok számára természettudományos háttérrel* biztosító evolúciós játékelmélet módszereit, céljait illetve eredményeit különböző fórumokon (egyetemi előadásorozatok, szemináriumok, nemzetközi nyári iskola, blogos találkozók) népszerűsítették.

Igen széles körben (rádió, TV, előadások, könyv) sikerült ismertetni a különböző *népességcsoportok zenéje és nyelve közötti rokonság* (hasonlatosság) számszerűsítésére kidolgozott módszerük eredményeit és ígéretes jövőbeli alkalmazásait.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A Nanoszerkezetek osztály keretében alakult meg a Koreai-Magyar Nanotudományok Közös Laboratórium az MTA és a Koreai Alapvető Tudományos Tanács közötti egyezmény keretében.

A nanoszerkezetek osztály vezetője a European Materials Research Society 2011 májusában, Nizzában sorra kerülő konferenciájának megszervezésében vett részt.

Rendszeres kapcsolat a Cranfield Egyetemen Prof. Jeremy Ramsden, az MFA tanácsadója csoportjával.

Kutatási együttműködés a svájci Creoptix céggel (Kaspar Cottier), új műszert eredményez.

Kutatási együttműködés a magyar Semilab Zrt-vel, és az Állami Nyomdával új műszereket eredményezett.

Koreai-magyar kormányközi TÉT projekt keretében „Biomaterials, new concepts and applications” címmel szerveztek bilaterális workshopot. Az MFA és a Gangneung-Wonju Nemzeti Egyetem Fogászati és Korrekciós Arcsebészeti Klinikája megegyezése értelmében az ázsiai országban folytatódik a hazai nano-hidroxiapatit alkalmazásának továbbfejlesztése és gyakorlati kipróbálása csont helyreállító műtéteknél.

A számítógépes szimulációk felgyorsításában jelentős szerep jut a közeli jövőben a sokprocesszoros grafikus kártyával felszerelt olcsó számítógépeknek. Ebben a szoftver fejlesztési és tesztelési folyamatban két nemzetközi együttműködésen keresztül (DAAD-MÖB: Development and Application of Massively Parallel Graphical Processors for Statistical Physics, FZD Dresden; FP7-ICT OSIRIS: Towards an Open and Sustainable ICT Research Infrastructure Strategy) csatlakoztak az európai kutatási csoportosulásokhoz. Vállalták a Magyar Fizikus Hallgatók Egyesülete (MAFIHE) által szervezett nemzetközi nyári iskola (Balaton Summer School, Balatonyörök, 2010. július 11-18) „Self-organization and Networks” szekciójának programszervezését és ezen belül számos előadás megtartását.

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége

2010-ben hat kutató szerzett PhD fokozatot. Az MFA-ban hat emeritus és hat kinevezett egyetemi tanár (két tanszékvezető), egy docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozik. Vezető munkatársaik zöme oktat az ELTE, BME, SE, PE, DE, ME, SZTE, PTEK, PPKE, BMF különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, doktori és habilitációs tanácsának, többen a doktori iskolák alapító, ill. tőzstagjai. Az intézetben működik a veszprémi Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar Nanoszenzorika Professzori Laboratóriuma, a BME VBMK-val közös Nanokémiai Laboratórium, a BMFK KKVMK-val közös Molekulasugaras Epitaxiás Laboratórium, a BME TTK-val közös Elektronsugaras Litográfiai labor és a PPKE Információs Technológiai Karral közös MEMS laboratórium. Preparatív és analitikai laborjaikban rendszeres gyakorlatokat tartanak a graduális és posztgraduális képzés számára külső támogatás nélkül. 2010-ben 23 hallgató folytatta PhD kutatásait az MFA-ban.

Részvétel a hazai tudományos közéletben

Az MFA kutatói adnak egy MTA lev. tagot, három fő MTA doktorképviselőt, egy-egy tagot az Élettelen Természettudományi Szakbizottságban; az MTA Vagyonkezelő Testületben. Az MFA munkatársa közül kerül ki az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság titkára és 7 tagja, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság négy tagja, az MTA Anyagtudományi Komplex Biz. négy tagja, az MTA Orvosi Informatikai Munkabizottság egy tagja, a VEAB egy tagja, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagja, a VEAB Egészségügyi Informatikai Munkabizottság elnöke. Az MFA delegálta az OTKA Elektrotechnikai és Elektronikai Zsűri elnökét és egy tagját, az ELFT főtitkárát, az ELFT tanács egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport titkárát, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport egy vezetőségi tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat elnökét és egy vezetőségi tagját, a Magyar Orvosi Lézer és Optikai Egyesület egy vezetőségi tagját, a Kémiai és Kohászati Munkabizottság elnökét, az Egészségügyi Telematikai Munkacsoport egy tagját, a Magyar Anyagtudományi Egyesület titkárát, az Integrált Mikro/nanoszerkezetek Nemzeti Technológiai Platform szakmai vezetőjét és irodavezetőjét.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok

Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca, MICRON, Nanopages valamint a "The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy", „IEEE Sensors Journal” szerkesztőbizottsági tagja. IUPAP C13 Biz. tag, International Society of Electrocardiology vezetőségi tag, IUVSTA hazai képviselő, IUVSTA Nemz. Bizottság több tagja, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, EUROSENSORS International Steering Committee tagja, ENIAC Scientific Council tagja.

Nemzetközi kapcsolatok

Az MTA MFA a World Forum of Materials Research Institutes tagja.

Az MFA kutatói közül többen rendszeres bírálók az Európai Bizottságnál és az ERC programjaiban.

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, J. Kepler Uni. Linz, Krakow, Wien, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center, stb.) mellett 2010-ben is olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Mahle, Volvo, GE Hungary, Tateyama, Picosun Oy, Weszta-T, Állami Nyomda, Semilab, BEH, stb.

Gyümölcsöző a kutatási-oktatási kapcsolat a Babes-Bolyai Egyetemmel (Kolozsvár) és a Sapientia Egyetemmel.

Az intézet a beszámolási évben egy-egy orosz, belga, cseh, szlovák, lengyel, ukrán és bolgár MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápolt. Tét támogatással két szlovén, egy-egy japán, dél-afrikai, osztrák, horvát és szlovák kapcsolatuk volt.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

OTKA: A tárgyévben hat új OTKA pályázatuk nyert támogatást.

Nemzetközi pályázatok

A 2010-ben indult a Koreai-Magyar Nanotudományok Közös Laboratórium grafén kutatásra.

Díjak, címek, fokozatok

2010-ben az MFA kutatói a felsorolt díjakat, címeket és fokozatokat nyerték el: a Miskolci Egyetem díszdoktora, a Nemzetközi Vákuum Unió (IUVSTA) tudományos díja, az MTA levelező tagja, Charles Simonyi Kutatói Ösztöndíj, Junior Prima Díj – fizikai tudomány, Magyar Köztársasági Érdemrend Lovagkeresztje, MFA díj (PhD hallgató), MFA díj (posztdoktori), MFA díj (kutatói), MFA Kiváló Kutatástámogatásért Díj.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Nemes-Incze P, Magda G, Kamaras K, Biro LP: Crystallographically selective nanopatterning of graphene on SiO₂. Nano Research, 3 (2): 110-116 (2010)
2. Krauss B, Nemes-Incze P, Skakalova V, Biro LP, von Klitzing K, Smet JH: Raman Scattering at Pure Graphene Zigzag Edges. Nano Letters, 10 (11): 4544-4548 (2010)
3. Munoz MA, Juhasz R, Castellano C, Odor G: Griffiths Phases on Complex Networks. Physical Review Letters, 105 (12): 128701-1-128701-4 (2010)
4. Perc M, Szolnoki A: Coevolutionary games—A mini review. Biosystems, 99 (2): 109-125 (2010)
5. Czigány Zs, Hultman L: Interpretation of electron diffraction patterns from amorphous and fullerene-like carbon allotropes. Ultramicroscopy, 110 (7): 815-819 (2010)
6. Szenes G, Kovacs VK, Pecz B, Skuratov V: The Effect of Heavy Cosmic-Ray Ions on Silicate Grains in the Interstellar Dust. Astrophysical Journal, 708 (1): 288-292 (2010)
7. Kurunczi S, Németh A, Hülber T, Kozma P, Petrik P, Jankovics H, Sebestyén A, Vonderviszt F, Fried M, Bársony I: In situ ellipsometric study of surface immobilization of flagellar filaments. Applied Surface Science, 257: 319-324 (2010)
8. Vértesy G, Uchimoto T, Tomáš I and Takagi T: Nondestructive characterization of ductile cast iron by Magnetic Adaptive Testing. J.Magn.Magn.Mater., 322: 3117-3121 (2010)
9. Nagata T, Volk J, Haemori M, Yamashita Y, Yoshikawa H, Hayakawa R, Yoshitake M, Ueda S, Kobayashi K, Chikyow T: Schottky barrier height behavior of Pt–Ru alloy contacts on single-crystal n-ZnO. Journal of Applied Physics, 107: 103714-1-103714-6 (2010)
10. Tapasztó O, Balázsi Cs: The effect of milling time on the sintering kinetics of Si₃N₄ based nanocomposites. Ceramics International, 36 (7): 2247-2251. (2010)
11. Fekete Z, Sinkovics B, Rajta I, Gál GAB, Fürjes P: Characterisation of the end-of-range geometric effects in complex 3D silicon micro-components formed by proton beam writing. Journal of Micromechanics and Microengineering, 20: 064015 (2010)
12. Szentpáli B, Basa P, Fürjes P, Battistig G, Bársony I, Károlyi K, Berceli T, Rymanov V, Stöhr A: Thermopile antennas for detection of millimeter waves. Applied Physics Letters, 96, 133507 [doi.: 10.1063/1.3374445] (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	135	Ebből kutató ² :	77
PhD, kandidátus:	43	MTA doktora:	13
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			6
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			15

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			150
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			148
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	8	idegen nyelven: 1
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 112
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 82
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	191,58	Összes független hivatkozás száma:	2427
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	2487		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	6	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	1	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			55
		posztterek száma:	45
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	4		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			37
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	13
Diplomamunka (MSc):	21	PhD:	25

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	635,04	MFt		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	10	Teljes saját bevétel:	546,86	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			18,5	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			26	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		64,53	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			13	
NKFP:	4	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	126,08	MFt
Egyéb:	9	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			3	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		5,33	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			23	
EU forrásból:	12	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	161,22	MFt
Egyéb:	11	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	38,01	MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			175,6	MFt

RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET

1053 Budapest, Reáltanoda u. 13-15, 1364 Budapest, Pf. 127.

telefon: 1-483 8302; fax: 1-483 8333

e-mail: ppp@renyi.hu; honlap: <http://www.renyi.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet a nemzetközi matematikai élet jelentős központja, 2010-ben is megőrizte az évek során kivívott rangját, pozícióját a világ matematikai kutatásainak élvonalában.

Az intézet tevékenysége kilenc tudományos osztály keretei között folyik. A Lendület program támogatásával 2009-ben létrejött *kriptográfiai kutatócsoport* folytatta munkáját a Diszkrét Matematika Osztály keretein belül, 2010-ben pedig *alacsony dimenziós topológia kutatócsoport* kezdte meg működését az Algebrai Geometria és Differenciál-topológia Osztályon. Mindegyik osztály szoros kapcsolatban áll az általa művelt kutatási területek más vezető központjaival. Ennek köszönhetően kutatási programjukat folyamatosan a matematika fejlődése által felvetett legújabb kérdésekhez igazítják.

Az intézet munkatársai közül 2010-ben három kutatót az MTA rendes tagjává, egy kutatót levelező taggá választottak, egy kutató szerzett akadémiai doktori címet, továbbá három kutató PhD fokozatot. Az év végén 14 akadémikus (az átlagos statisztikai állományi létszám szerint 12), továbbá 28 (st. átl. 24) akadémiai doktor, 31 (st. átl. 30) kandidátus, illetve PhD fokozattal rendelkező kutató dolgozott az intézetben. Nagy hangsúlyt fektetnek a fiatal – PhD tanulmányaikat folytató vagy azt éppen befejező – tehetségek bevonására az intézeti kutatómunkába. 2010 folyamán további 6 új fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémiától kapott 4 új, illetve a megüresedő álláshelyeken. Az intézet kutatói a Közép-Európai Egyetemmel közösen folytatott PhD képzés keretében 14 doktorandusz munkáját irányították. Az utóbbi években kinevezéssel felvett fiatalok mellett, a korábbi években odaítélt, de még le nem járt fiatal kutatói ösztöndíjakat is beszámítva, 2010-ben is 16 fő ígéretes tudományos kutatói utánpótlás nevelésére volt az intézetnek lehetősége.

Az intézet munkatársai – a megelőző évekhez hasonló számban – 2010 során 167 dolgozatot publikáltak, amelyből 164 tudományos publikáció, 3 pedig ismeretterjesztő. A tudományos publikációk közül 5 szerkesztett mű, 1 akadémiai doktori értekezés, 3 PhD értekezés, 7 tudományos könyvfejezet, 30 konferenciacikk, 1 hazai tudományos folyóiratban magyarul, 117 pedig referált folyóiratban világnyelveken jelent meg, amelyből 109 külföldi folyóiratban, 8 pedig nemzetközileg elismert hazai angol nyelvű kiadványokban került publikálásra.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Algebra Osztály

- Az ortogonális csoport reprezentációelméletét alkalmazták valós szimmetrikus mátrixok diszkriminánsának négyzetösszeg előállítására. Bebizonyították, hogy a harmadrendű esetben a négyzetösszeg előállításban szereplő tagok minimális száma öt, míg a negyedrendű esetben létezik héttagú négyzetösszeg előállítás. Az általános n -edrendű

esetben pedig belátták, hogy létezik olyan előállítás, ahol a tagok száma megegyezik az n -változós n -edrendű Laplace-féle gömbharmonikus polinomok terének dimenziójával.

- Vizsgálták azokat a véges p -csoportokat, amelyeknek pontosan egy nemtriviális karakterisztikus részcsoporthoz van. Ezzel Taunt 1955-ben megkezdett, de soha be nem fejezett kutatását kiegészítve, többek között meghatározták az összes ilyen tulajdonságú csoportot, amely legfeljebb négy elemmel generálható.
- Nem-kommutatív csoportok esetére is sikerült alsó becslést bizonyítaniuk összeshalmazok méretére vonatkozóan, felhasználva egy olyan klasszikus csoportelméleti tételt, amit korábban ebben a témakörben még nem alkalmaztak.
- Belátták, hogy Ramanujan gráfokban kevés rövid kör van. Pontosabban, egy tetszőleges d -reguláris Ramanujan gráfsorozat lokálisan konvergál a d -reguláris fához.
- Vizsgálták invariáns véletlen részcsoporthoz szerkezetét. Ezek olyan eloszlások egy adott csoport részcsoporthoz, amik invariánsak a konjugálásra. Belátták, hogy a normális részcsoporthoz vonatkozó spektrális alaptétel teljesül invariáns véletlen részcsoporthoz is.
- Belátták, hogy egy megszámlálható csoport tetszőleges olyan hatása, amely megtartja a szabad valószínűségi mértéket, gyengén tartalmazza a csoport összes Bernoulli-hatását.
- Sikerült bizonyos értelemben erősíteni a híres, 40 év után bizonyított $k(GV)$ tételt, ami a GV csoport $k(GV)$ konjugáltsági osztályainak számára ad becslést.
- A háromszor hármas mátrixhármasok szemi-invariánsai algebrájának generátorai közt fennálló egyetlen algebrai relációt expliciten kiszámították. Kimutatták a kapcsolatot ezen probléma és több más nevezetes invariánselméleti alaphelyzet között.
- A megszorításos félcsoporthoz bizonyos axiómáknak eleget tevő biunér félcsoporthoz, amelyek az inverz félcsoporthoz egyféle nem-reguláris általánosításaiként tekinthetők. Bebizonyították, hogy minden megszorításos félcsoporthoz van olyan valódi fedője, amely beágyazható (az unér műveleteket is megőrizve) valamely félháló monoiddal vett W -szorzatába.
- Lokálisan egységelemes félcsoporthoz Morita-ekvivalenciájáról számos új eredmény született, az elmélet jelentős részét kiterjesztették faktorizálható félcsoporthoz. Ezen a téren a legfontosabb új eredmény a Morita-ekvivalencia jellemzése Rees mátrix fedés segítségével (az MTA-Észt TA együttműködés keretében).
- Sikeresen folyik a bolgár és az észti MTA-együttműködésük (ezek keretében több dolgozat megírása van folyamatban), és biztató eredmények vannak a vietnami MTA-együttműködésben is. A dél-afrikai TÉT-együttműködésük sajnos szünetel a TÉT-keret felfüggesztése miatt.

Algebrai Geometria és Differenciál-topológia Osztály

- Belátták a Heegaard-Floer homológia kombinatorikus voltát. Az új eredmény azt biztosítja, hogy az invariáns csak kombinatorikus módszerekkel is megadható.
- Tanulmányozták az Abel-varietásokhoz vonatkozó Weil-párosítás lehetséges definíciói közötti kapcsolatot, illetve ezek általánosítását 1-motívumokra. Fontos alkalmazásokat kaptak az Iwasawa-elméletben, illetve a Deligne-féle 1-motívumok kohomológiájára vonatkozó dualitási eredményeket illetően.
- Adott egy Lie-típusú véges egyszerű csoport. Ennek lehet tekinteni egy tetszőleges generátorrendszerét és ezek hatványait. Belátták, hogy a hatványok mérete minden esetben exponenciális ütemben növekszik mindaddig, míg el nem éri a csoport méretét. Ezt az állítást korábban csak nagyon speciális csoportokra ismerték. Az új eredménynek számos

alkalmazása van: jól használható bizonyos számelméleti szita-módszerekben és expander gráfok konstrukciójában.

- Osztályozták azokat a felület-szingularitásokat, amelyeknek racionális gölyő kisímitásai vannak. Ezeket régebben csak sajátos esetekben ismerték, most tisztázódott minden súlyozott homogén szingularitás esete.
- Kiterjesztették a Denef–Loeser-féle Monodrómia Sejtést szinguláris sokaságokra és differenciálformákra. A Monodrómia Sejtés a fenti két objektum egységét célozza meg, ez az algebrai geometria egyik legtermékenyítőbb sejtése. A mostani eredmények az általános eset megértésében jelentenek fontos lépést.
- Bebizonyították, hogy egy nem-izolált komplex felület szingularitás Milnor-fibrumának pereme egy gráf 3-sokaság. Megszerkesztettek egy algoritmust, amely meghatározza a megfelelő gráfot. Ennek segítségével több szingularitáselméleti invariáns is kiszámolható, például a monodrómia karakterisztikus polinomja.

Algebrai Logika Osztály

- A speciális relativitáselmélet kinematikáját fotonok és fényaxióma nélkül elsőrendű logikában axiomatizálták három egyszerű axiómával (a fizikai relativitás elvének egy töredéke, a valós számokra vonatkozó ún. folytonossági axiómaséma, és olyan két megfigyelő létezése, akik úgy látják egymás sajátidejéről (óráiról), hogy a másiké lassabb mint az övék).
- Az általános relativitáselméletre is adtak egy hasonló szellemű, fotonokat nem használó elsőrendű logikai axiómarendszert. Erre egy erős logikai teljességi tételt sikerült bizonyítaniuk, nevezetesen bizonyították, hogy axiómarendszerük definíciósan ekvivalens a 3-sima Lorentz-sokaságok egy elsőrendű elméletével.
- Megadták az általános relativitáselméletnek egy olyan (elsőrendű logikai) axiómarendszerét, amely természetes folytatása egy korábbi axiómarendszerüknek, teljes az elmélet standard modelljeire (a Lorentz-sokaságokra) nézve, továbbá az előző axiómarendszerrel ellentétben, ebben az elméletben a geodetikusok fogalma nem csak definiálható, hanem egybeesik a geodetikusok szokásos fogalmával.
- Megmutatták, hogy a megfigyelők fénynél gyorsabb mozgásának lehetőségéből, a folklórral ellentétben, logikailag nem következik a zárt időszerű görbék létezése (időutazás/kauzalitásvetés lehetősége).
- Bizonyították, hogy a kompozíció és jobb- illetve baloldali reziduáltja a diszjunkcióval együtt nem axiomatizálható véges sok axiómával.

Analízis Osztály

- Megvizsgálták, hogy milyen formában lehet bebizonyítani a klasszikus Markov-egyenlőtlenséget többváltozós polinomokra. Monoton polinomok esetére vonatkozó újabb becsléseket láttak be.
- A klasszikus Kantorovich-operátor egy új, súlyozott változatára újabb konvergencia-tételeket bizonyítottak.
- Új bizonyítást sikerült találni a háromszög típusú Fourier-sorokra vonatkozó operátornorma kiszámítására.
- Bernstein-típusú operátorokra vonatkozó Grünwald–Marcinkiewicz-típusú tételt láttak be.
- Sajnálatos módon a sok éve működő approximációelméleti csereegyezmény a Bolgár TA-val erre a ciklusra nem nyert támogatást. Ennek ellenére a Szópolban rendezett konstruktív függvénytan konferencián részt vettek OTKA-keretből, és a konferencia

kötetébe küldtek egy áttekintő cikket a polinomok deriváltja becslésére vonatkozó Bernstein-féle egyenlőtlenségnek a többváltozós konvex halmazokra vonatkozó általánosításával kapcsolatos kutatásairól, melyek az utóbbi években sok kérdést tisztáztak.

Diszkrét Matematika Osztály

- Kutatták a nagy hálózatok elméletét. Ezek elsősorban az óriás gráfok szabályosságaira vonatkoznak, mint pl. a szociális hálózatok, vagy az internet hálózatok. Optimális algoritmust dolgoztak ki periodikus részgráfok keresésére óriásgráfok sorozataiban.
- Több fabeágyazási eredményt bizonyítottak, korábbi eredményeiket javítva. Ezek közül kiemelkedik egy, a korlátos fokú fa beágyazására vonatkozó eredményük.
- Élesítették a Toft problémájára bizonyított korábbi eredményt color-kritikus hipergráfokra vonatkozóan.
- Extremális 0-1-mátrixokkal kapcsolatban megfogalmaztak egy sejtést adott nyomot nem tartalmazó hipergráfok maximális méretére, majd a sejtés számos speciális esetét bebizonyították.
- Kiterjesztették Erdős és Gallai utakra vonatkozó extrém gráfelméleti tételét r -uniform hipergráfokra.
- Becslést adtak olyan számhalmazok méretére, ami nem tartalmazza k elem szorzatának osztóját. Ezzel általánosították Erdős klasszikus eredményét, a $k = 2$ esetet.
- Újabb tételeket bizonyítottak gráfok adott pontokon átmenő köreinek létezéséről különféle összefüggőségi feltételek teljesülése esetén, ha a gráf nem tartalmaz négyágú csillagot feszített részgráfként.
- Egy újszerű keresélméleti kérdésre érdekes eredményeket bizonyítottak: adott tulajdonságú elem nem-adaptív keresésére bebizonyították, hogy n kérdés szükséges egy n elemű halmazban, ha több elem is lehet a halmazban és csak azt lehet megkérdezni, hogy adott halmaz tartalmaz-e kérdéses tulajdonságú elemet.
- Folytatták véletlen politópokra vonatkozó kutatásaikat. A fellépő szórásokra nagyságrendileg pontos becslést adtak, illetve centrális határeloszlás tételt igazoltak bizonyos speciális esetekben.
- Ekvivariáns topológia segítségével megoldottak több konvex geometriai kérdést. Sikertült egy homogén hipersík-választási tételt is igazolniuk.
- Véges geometriában újabb lefogási tételeket bizonyítottak.
- Ismert, hogy a komplex csoportalgebrák és a von Neumann algebrájuk Ore bővítése között mindig van egy minimális reguláris *-algebra. A gráflimeszek elméletéből származó kombinatorikus módszerekkel sikerült bebizonyítaniuk, hogy amenábilis csoportok esetén ez az algebra kanonikus, magából a csoportból kiszámítható.
- Provéges hatások ergodikus tulajdonságai és a gráfexpanderek kapcsolatát vizsgálták. Belátták, hogy a szabad csoportnak kontinuum sok gyengén inekvivalens ergodikus szabad hatása van. Ugyancsak sikerült egy szuperrigiditási tételt bizonyítaniuk provéges hatásokra. Bebizonyították Lubotzky egy expanderekre vonatkozó sejtését.
- Folytatták a klasszikus extremális gráfelmélet tételeinek kidolgozását geometriai gráfokra.
- Bebizonyítottak több új Ramsey eredményt, pl. a monokromatikus körökre vonatkozóan.
- Érdekes színezési eredményeket bizonyítottak topológiai módszerek felhasználásával.
- A titkosítás matematikai elméletével kapcsolatos, illetve a pszeudo-véletlen sorozatok, rácsok, és egyéb pszeudo-véletlen struktúrákkal kapcsolatban különböző eredményeket bizonyítottak.
- Hatékony, a biomatematikában használható kombinatorikus algoritmusokat dolgoztak ki.

- Vizsgálták a Monte-Carlo-Markov-Lánc eloszlás-generáló algoritmusok viselkedését, alkalmazhatóságát nagy struktúrákon.

Geometria Osztály

- Alsó becslést adtak egy gömbelhelyezés gömbjeit elkerülő két pontot összekötő legrövidebb út hosszára. Kiderült, hogy magas dimenziók esetén a gömbök elkerülése csak nagyon kis kerülőre kényszerít.
- Egy gráf metszési száma a lerajzolásához szükséges metszések minimális száma, pármetszési száma pedig a lerajzolásához szükséges metsző élpárok minimális száma. Sikertült a két paraméter értéke közötti becslésen javítani string gráfokra vonatkozó szeparátor tételek segítségével.
- Egy gráf monoton metszési száma a lerajzolásához szükséges metszések minimális száma olyan lerajzolásokra, ahol az élek x -monoton görbék. Sikertült olyan gráfot találni, amelynek a monoton metszési száma nagyobb, mint a közönséges metszési száma. Ugyanakkor sikertült megmutatni, hogy a monoton metszési szám nem lehet tetszőlegesen nagy, ha a közönséges metszési szám rögzített.
- Tovább vizsgálták az Erdős–Szekeres-tétel általánosítását olyan ponthalmazokra, amelyek nem tartalmaznak valamilyen rögzített konfigurációt és bizonyos esetekben javították az eddigi eredményeken.
- Konvex testek centrális szimmetriájának karakterizációjával foglalkoztak. Ha az egységgömb egy perturbációjára, bármely párhuzamos hipersíkokkal való metszetek közül a legnagyobb felszín az origót tartalmazó hipersíkra valósul meg, akkor a perturbáció első rendben centrálisan szimmetrikus. Ez a kutatás a DFG támogatásával megvalósult utazás eredménye.
- Két konvex lemezt keresztezőnek nevezünk, ha a közös részük eltávolítása után mindkét lemez két diszjunkt részre esik szét. A hetvenes évektől kezdve mindenki úgy gondolta, hogy gazdaságos (azaz kis sűrűségű) fedésekben keresztező párok felhasználása mindig elkerülhető. Sikertült azonban olyan lemezt találniuk és megmutatniuk, hogy a sík e lemez egybevágó példányokból álló fedésében mindig előfordulnak keresztező párok.
- Kutatásokat végeztek az egységkör Csebisev-konstansainak meghatározására. Sikertült az L_2 Csebisev-konstansokat kiszámítani. Vizsgálták a metsző egységkörlemezek problémájának egydimenziós változatát, meghatározták a középpont határeloszlását és a hossz várható értékét.
- Belátták, hogy ha két test a koordináta-hipersíkokra szimmetrikus, akkor a logaritmikus közepük térfogata legalább a két térfogat mértani közepe. Ez az egyenlőtlenség erősebb a Brunn–Minkowski-egyenlőtlenségnél ebben az esetben.
- Bizonyítást adtak Gromov sejtésére, miszerint vannak olyan tetszőlegesen nagy, korlátos $(d + 1)$ -uniform hipergráfok, melyek önátfedési száma legalább egy $c(d) > 0$ konstans.
- Haussler és Welzl nevezetes tétele szerint bármely korlátos VC-dimenziós hipergráfban van kicsi ε -háló. A várakozásokkal ellentétben bizonyítást nyert, hogy vannak olyan geometriai módon definiált 2 VC-dimenziós hipergráfok a síkban, melyre a fenti becslés éles.

Halmazelmélet és Topológia Osztály

- A majdnem diszjunkt halmazrendszerek kromatikus számaira vonatkozó klasszikus eredmények analógiájára lényegében teljes leírását adták az ilyen halmazrendszerek ún. konfliktus-mentes kromatikus számainak.

- A metrikus és a rendezett terek közös általánosítását adó monoton normális terek felbonthatóságáról szóló korábbi eredményeiket jelentősen továbbfejlesztve belátták, hogy pontosan akkor maximálisan felbontható minden monoton normális tér, ha minden uniform ultraszűrő maximálisan feldarabolható. Ennek érdekes következménye, hogy nem maximálisan felbontható monoton normális tér létezése ekvi-konzisztens egy mérhető számosság létezésével.
- A kompakt szétszórt terek számosságosorozatait sok éve vizsgálják, s komoly eredmény, hogy sikerült ezek lehetséges értékeit pontosan meghatározni, legalábbis a halmazelmélet bizonyos modelljeiben.
- A funkcionálanalízis régi kérdése, hogy bizonyos klasszikus Banach-terekbe milyen más Banach-tereket és milyen módon lehet beágyazni. Az utóbbi időben derült ki, hogy a válasz e kérdésre sok esetben halmazelméleti módszereket és eredményeket igényel. Az általuk korábban a klasszikus Cohen-modell kapcsán bevezetett kombinatorikus elveket bizonyos Banach-terek nem-beágyazhatóságára tudták alkalmazni.
- Az A feletti klónok olyan A -n értelmezett (sokváltozós) függvényekből álló halmazok, melyek tartalmazzák a projekciókat és zártak a kompozícióra. A véges halmazok feletti klónok tanulmányozása a modern algebra klasszikus területe, míg a végtelen halmazok esete jóval kevésbé ismert. Megmutatták, hogy egy megszámlálhatóan végtelen halmazon van olyan D klón, hogy minden n természetes számra maximális számú olyan klón van, melyek mind ugyanazokat a D -beli n -változós függvényeket tartalmazzák.
- Értékes eredményeket értek el a geometriai mértékelmélet és a halmazelmélet határterületén. Megoldották például Fremlin és Zapletal egy-egy problémáját, mindkét esetben a Hausdorff-mértékekkel kapcsolatos függetlenségi eredményt bizonyítva.

Számelmélet Osztály

- Általános valós kvadratikus algebrai számtestekhez tartozó Hecke L -függvények 0 -ban és negatív egészekben felvett speciális értékeire bizonyítottak egy formulát. E formula a speciális értéket a kvadratikus test egy generátorának a lánctörtjegyeivel fejezi ki. A formula speciális eseteit már sikerrel alkalmazták korábban osztályszámproblémák (Yokoi- illetve Chowla-sejtés) megoldására.
- Aszimptotikus formulát adtak Randkin-Selberg L -függvények második momentumára bizonyos arkhimédészi családokban. Egy fontos speciális eset a holomorf csúcsformákhoz társított L -függvények negyedik momentumát becsüli.
- Új becslést adtak Hecke-Maass csúcsformák szuprémumára a szint tekintetében. Ez az eredmény olyan erős és természetes, mint a Dirichlet L -függvényekre vagy a csavart moduláris L -függvényekre vonatkozó Burgess-korlát.
- Az összeghalmazok számosságára vonatkozó Plünnecke-egyenlőtlenséget kiterjesztették nemkommutatív csoportra.
- Meghatározták, hogy az egész számok halmazán értelmezett normák közül melyekben végezhető el az euklideszi algoritmus.

Valószínűségszámítás és Statisztika Osztály

- Az ún. Albert–Barabási-gráfok általánosításaként találtak egy véletlen gráf modellt, melyben a fokszámok elégséges statisztikát adnak. Ebben bizonyították az ún. maximum likelihood becslés létezését és egyértelműségét. A modell globális tesztelésére a regularitási lemmában szereplő statisztika bizonyult a leghatékonyabbnak.

- Vizsgálták, hogy stacionárius sztochasztikus folyamatok eloszlása milyen pontossággal becsülhető véges minta alapján, az Ornstein-féle d -vonás távolság értelmében. Az irodalomban először sikerült a folyamatok elég tág (nemparaméteres) osztályára érvényes explicit eredményeket bizonyítani.
- Új eredményeket bizonyítottak többfelhasználós modellekre titkos kulcs generálásáról a felhasználók bizonyos koalíciói számára.
- Pólya György klasszikus tétele szerint a kétdimenziós rácson történő bolyongás egy valószínűséggel végtelen sokszor visszatér a kiinduló pontba. Meglepő módon ez a tulajdonság megmarad akkor is, ha egyetlen vízszintes egyenest tartunk meg. Ezt a gráfot nevezik kétdimenziós fésűnek. Bebizonyították, hogy a kétdimenziós fésű örökli az eredeti bolyongás összes ismert aszimptotikus tulajdonságát, többek között az erős invariancia elvet és iterált logaritmus tételt.
- Stacionárius, gyengén függő folyamatok egy tág osztályára bizonyítottak egy ún. megosztott invariancia elvet. Továbbá számos eredményt nyertek hézagos sorok strukturális és aszimptotikus tulajdonságaira.
- Normális eloszlású valószínűségi változók polinomjainak gazdag osztályán vett maximumára pár éve megjelent egy meglepő eredmény. Több év munkája révén sikerült tisztázni, hogy noha az eredeti bizonyítás komoly hiányosságokat tartalmaz, az javítható, és az eredmény érvényes.
- Folytatták a munkát gyengén függő nem-korlátos spin-rendszerek logaritmikus Szobolev-konstansának becslésére. Sikerült túllépni Otto és Reznikoff vonatkozó eredményén.
- Kipnis és Varadhan 1985-ben megmutatták, hogy a sokdimenziós kizárásos folyamat esetén két részecske együttes diffúziója aszimptotikusan független Brown-mozgás, ellentétben az általuk 1980-ban vizsgált egydimenziós Harris–Spitzer-moddal. Igen érdekes lenne hasonló dinamika megértése olyan modellek esetén, ahol energiacsere is van, ott Brown mozgások keverékét várják. Sikerült ezt a dinamikai modell sztochasztikus paradigmájára belátni, azaz két kölcsönható belső állapotú bolyongásra.
- Valószínűségi változók sztochasztikus kapcsolatának mérésére a Pearson-féle korrelációs együttható a normális eloszlás esetén jól használható, de a gyakorlatban többnyire nem teljesül a normalitás feltétele. Kifejlesztettek egy új és effektív mérőszámot, amely csupán a két változó belső távolságait használja.
- Megadtak egy teljesen polinomiális randomizált approximációs sémát a legtakarékosabb dupla vágás és kötés utak számának a becslésére. Megmutatták, hogy az ilyen útvonalakon megadható olyan energiafüggvény, amelynek minden lokális minimuma globális, és ezek a minimumhelyek pontosan a Hannenhall–Pevzner-utak. Implementáltak egy parallel MCMC metódust erre az eredményre alapozva és tesztelték gerinces genom adatokon.

Alkalmazások

Az intézet fő profilja a matematikai (alap)kutatásokhoz sorolható, az intézetben vizsgált kutatási témák többségének nincs közvetlen alkalmazott kutatási iránya. Az évek óta dolgozó, főleg a Diszkrét Matematika és a Valószínűségszámítás és Statisztika Osztályokhoz köthető kutatócsoportok, azaz a bioinformatikai, adatbázis kutatási, információelméleti és a matematikai immunológiai kutatócsoportok továbbra is működnek, bár az egyre szűkülő hazai pályázati lehetőségek mellett konkrét alkalmazott kutatási témákon a bioinformatikán kívül 2010-ben nem dolgoztak.

Az akadémiai Lendület program keretében 2009-ben benyújtott és elnyert kriptográfiai pályázat segítségével létrejött körülbelül 10 tagú kutatócsoport tovább folytatta munkáját a kitzűzött kriptográfiai témákban: a titokmegosztási protokollok, az ún. anonyim broadcast

protokollok és az ujljenyomat kódok vizsgálatának területén. A legfontosabb elért eredmények a titokmegosztás területéhez kötődnek, melyben több, átütő sikert ért el a kutatócsoport. Meghatározták a fa gráfokon alapuló titokmegosztások komplexitását (ez az első természetes gráfosztály, melyre ez az érték ismert), valamint fontos eredményeket értek el az úgynevezett Turán-típusú (multipartite) struktúrák vizsgálatánál. A titokmegosztáshoz kapcsolódóan bevezették az úgynevezett online titokmegosztás fogalmát, mely esetben a titokrészek szétoztásánál az osztó nem ismeri a résztvevő pontos helyét a struktúrában, csak annak a már meglévő részét. A fogalom alkalmas hatékony kriptográfiai eljárások megalapozására.

Az intézetben folyó bioinformatikai kutatások a korábbi intenzitással folytatódtak. 2010-ben lezárult az intézet EU FP6-os „Hungarian Bioinformatics” Transfer of Knowledge projektje, melynek keretében szeptember végéig még további 11 külföldi kutató látogatott az intézetbe 2-4 hónap időtartamra. A fő kutatási témák továbbra is a genom-átrendeződések tanulmányozására, szekvencia-illesztések és evolúciós törzsfák kapcsolatának vizsgálatára és új statisztikai módszerek kidolgozására irányultak.

Az intézet tagja, és egyben az egyik legnagyobb kutatási intézménye egy német és dán kisvállalkozások vezette konzorciumnak, mely 2009-ben benyújtott és 2010-ben elnyert egy EU 7 „Research for the benefit of specific groups” projektet „Comparative Genomics and Next Generation Sequencing” címmel. A támogatási szerződést 2010-ben megkötötték és az intézetben folyó érdemi munka megkezdődött. A Rényi Intézet a fő fejlesztő partnere több, a projekt célját képező programcsomagnak, valamint a teljes programcsomagot összekötő felhasználói felületnek.

Az óriásgráfok és hálózatok elméleti vizsgálata mellett olyan eredmények is születtek, melyeket a való életből származó (pl. szociológiai) kérdések motiváltak, és amik lehetővé teszik ezeknek a nagy hálózatoknak a hatékony, algoritmikus (gyakorlatban is alkalmazható) vizsgálatát.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet alapkutatási témái nem alkalmasak a társadalommal folytatott párbeszéd közvetlen tárgyának. Ugyanakkor több olyan tevékenység és esemény is zajlott az intézetben, ill. az intézet szervezésében, ami szélesebb körű érdeklődésre tarthat számot.

Az intézet munkatársai jelentős szerepet vállalnak a matematika népszerűsítésében, számos ismeretterjesztő előadást, filmvetítést, vitákat tartottak egyetemisták és középiskolások számára, többek között a Tudomány Ünnepe keretében is. Ugyancsak aktívan részt vesznek a matematikai tehetségek gondozásában, 2010-ben is tucatnyi matematikai tábor és egyéb programokat szerveztek általános és középiskolás diákok számára, amelyeknek eredményességét bizonyítja, hogy az országos tanulmányi versenyek első díjasainak és helyezetteinek többsége ezeknek a programoknak résztvevője volt az adott évben, ill. korábban.

Az intézet által Szemerédi Endre 70. születésnapjára rendezett konferencia kapcsán számos, a magyar matematika kiválóságát, Szemerédi Endrét, ill. általában a matematikát népszerűsítő cikk jelent meg a magyar és a nemzetközi sajtóban. Ugyancsak nagy sikere volt a *Math Art – Művészet a matematikusok világában* című, a B55 Kortárs Galériával közösen rendezett

kiállításnak, mely magyar és külföldi matematikusok, ill. társaik, barátaik képzőművészeti alkotásaiból nyílt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet kutatói számos budapesti és néhány vidéki felsőoktatási intézmény (pl. ELTE, BME, Debreceni Egyetem, Szegedi Tudományegyetem) munkájában vettek részt állandó oktatóként, különösen nagy részt vállaltak a felsőbb éves matematikus, illetve fizikus hallgatók és doktoranduszok részére tartott előadások tartásában. Az intézet és a Közép-Európai Egyetem (CEU) közös, angol nyelvű matematikus PhD és MSc programja nyolcadik évébe lépett. Jelenleg 20 PhD és 13 MSc 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 17 kurzust oktattak. Valamennyi egyetem hallgatóit számba véve 2010-ben intézeti témavezető irányításával 38 PhD hallgató, 23 szakdolgozó (14 MSc és 9 BSc) és 2 tudományos ösztöndíjas dolgozott. Az intézet dolgozói közül kerül ki a Budapest Semesters in Mathematics – főleg amerikai diákok részére szervezett angol nyelvű matematikus rész képzési program – tanárainak többsége is. 2010-ben az intézet 44 munkatársa, a kutatók 61%-a oktatott valamelyik hazai felsőoktatási intézményben. Az intézet kutatói által 2010-ben tartott egyetemi tanórák száma közel 5000.

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 AKT Matematikai és Természettudományi Szakbizottságában, az OTKA bizottságaiban, a Bolyai János Matematikai Társulat vezetőségében való részvétel. A Bolyai János Matematikai Társulat elnöke, a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj Kuratóriumának elnöke, az MTA Fiatal Kutatói Testület matematika szakterületi koordinátora, az MTA Matematikai Tudományok Osztályának elnökhelyettese, az MTA Matematikai Bizottság elnöke és titkára, a Matematikai Osztály Doktori Bizottságának elnöke és alelnöke, az MTA Biometriai és Biomatematika Bizottságának elnöke, az MTA SZTAKI Külső Tanácsadó Testületének elnöke, valamint a CEU Matematika Doktori Bizottság elnöke és alelnöke valamennyien az intézet kutatói.

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. 2010-ben az intézet 39 munkatársa vett részt (multiplicitással számolva) nemzetközi konferenciák vagy workshopok szervezésében, melyek közül ötöt részben vagy teljes egészében a Rényi Intézet szervezett. Ezek az együttműködések általában nem igényeltek intézményes formát, ugyanakkor eredményességüket mutatja például a nagyszámú közös tudományos cikk.

Az MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatok keretében megvalósult utazások eredményesen szolgálták a tudományos együttműködést, segítségükkel eredményes közös kutatások folynak, hasznos információcserére és időnként konferencia-részvételre nyílik lehetőség.

Az intézet kutatói 2010-ben 17 nemzetközi tudományos bizottsági tagságot, 114 nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagságot mondhattak magukénak, 218 előadást tartottak nemzetközi konferenciákon, sokat közülük meghívott, illetve plenáris előadóként. Ezek közül kiemelkedik az intézet egyik munkatársának meghívott előadása a Nemzetközi Matematikus Kongresszuson.

Az intézetből 14 kutató töltött 6 hónapnál hosszabb időt szakmai célból a következő intézményeknél: Technische Universität Graz (Ausztria), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svájc), Universitat Politècnica de Catalunya – Barcelona Tech (Spanyolország), Università di Roma „Tor Vergata” (Olaszország), Simon Fraser University (Kanada), Auburn University (USA), University of Delaware (USA), University College of London (Nagy-Britannia), University of Chicago (USA), Rutgers University (USA), City University of New York (USA), National Science Foundation (USA). A költségeket a meghívó fél fedezte.

2010-ben az intézetben már csak egy EU-s mobilitási pályázat futott, melynek keretében 11 vendégkutatót látott vendégül, összesen 23 hónapra. Az egyik, intézetben futó Lendület program keretében is alkalmazásra került egy külföldi (USA) munkatárs, ezen kívül említést érdemel, hogy az intézet fiatal kutatói között immár két amerikai kolléga is van. Az Európán kívüli országokból, de részben Európából is érkeztek további vendégek más forrásokból (Fulbright, OTKA, akadémiai csere, és egyre nagyobb mértékben az intézettől független, a látogató által szervezett forrásból) finanszírozott látogatások keretében. Az intézet matematikus látogatóinak száma 2010-ben – a konferencia-részvevőket nem is számítva – már közelít a százhoz.

A teljesen vagy részben az intézet által szervezett nemzetközi tudományos tanácskozások időrendi sorrendben az alábbiak voltak:

- All-Class Reunion of Budapest Semesters in Mathematics, 2010. június 16-23.
- 1st Emléktábla Workshop, 2010. július 26-29.
- Ninth Summer School in Potential Theory, 2010. július 26-31.
- Conference in honor of the 70th birthday of Endre Szemerédi, 2010. augusztus 2-6.
- The Mathematics of Vera Sós, 2010. szeptember 10-12.

Az intézet által rendezett konferenciák közül ki kell emelni a Szemerédi Endre 70. születésnapjára rendezett nemzetközi konferenciát, mely a szokásosnál is sokkal nagyobb szakmai és sajtó érdeklődést keltett. A konferenciának mintegy 250 résztvevője volt, a hazai támogatásokon kívül anyagilag támogatták az amerikai DIMACS és cseh DIMATIA kutatási központok, az amerikai National Security Agency és a Clay Matematikai Intézet.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

Az intézeti kutatócsoportok a korábbi évekhez hasonlóan jól szerepeltek a hazai OTKA pályázatokon, ennek ellenére a pályázati lehetőségek, illetve az általuk elosztott anyagi

források szűkülése miatt az ezen hazai projektekből származó összbevétel nem érte el az előző évek szintjét. Továbbra is elmondható, hogy az intézet kutatói szinte kivétel nélkül résztvevői különböző OTKA projekteknek, illetve az intézet adja be matematikából a legnagyobb számú OTKA projekt tervet, de a bevételek összvolumenének csökkenése súlyosan kihat a kutatások finanszírozására.

A korábbi évek tendenciái folytatódtak, mind a hazai, mind a nemzetközi, a felfedező kutatások részére kiírt pályázati lehetőségek tovább szűkültek 2010-ben. Az NKTH az év közepétől nem fogadott be további pályázatokat, és az év első felében kiírt – egyébként még az NKTH TECH09 2009 őszéről 2010-re átcúsúzott – felhívásokra beadott pályázatok (az intézet részéről két – az egyik konzorcionális – NKTH-OTKA és számos Mecénatúra pályázat) további sorsáról sincs a mai napig hír.

Továbbra is különösen értékesek, az intézet részére nagyon fontosak az akadémiai Lendület program keretében meghirdetett pályázata. A 2009-ben elnyert kriptográfiai kutatási pályázat mellett 2010-ben alacsony dimenziós topológiák kutatására kapott második Lendület projekt együttes támogatottsága adta a hazai, nem OTKA finanszírozású pályázati bevételek nagy részét (ezen kívül mindössze körülbelül 5 millió Ft különböző, többségében még 2009-ről áthúzódó, megkésített NKTH-s kifizetés történt).

Nemzetközi pályázatok

A korábbi években, főleg 2004-ben és 2005-ben indult EU FP6 kutatói mobilitási projektek, az ún. Transfer of Knowledge projektek nagyobb része 2009-ben, kisebb része 2010-ben zárult. A 7. keretprogram keretében több egyéni kutatói mobilitási program futott, melyek egy-egy külföldi vagy hazatérő magyar kutató alkalmazását tették lehetővé. Az ezen projektek támogatásával hosszabb távra érkező külföldi tudósok eredményesen vettek részt az intézeti kutatásokban, előadásaikkal, konzultációikkal új nemzetközi együttműködési lehetőségeket nyitottak meg. Az intézeti szintű mobilitási projektek támogatása az EU-ban megszűnt, így a mobilitási projektek a jövőben attól függenek, van-e éppen hosszú távon az intézetbe látogatni szándékozó pályázó. 2010-ben ilyen nem volt.

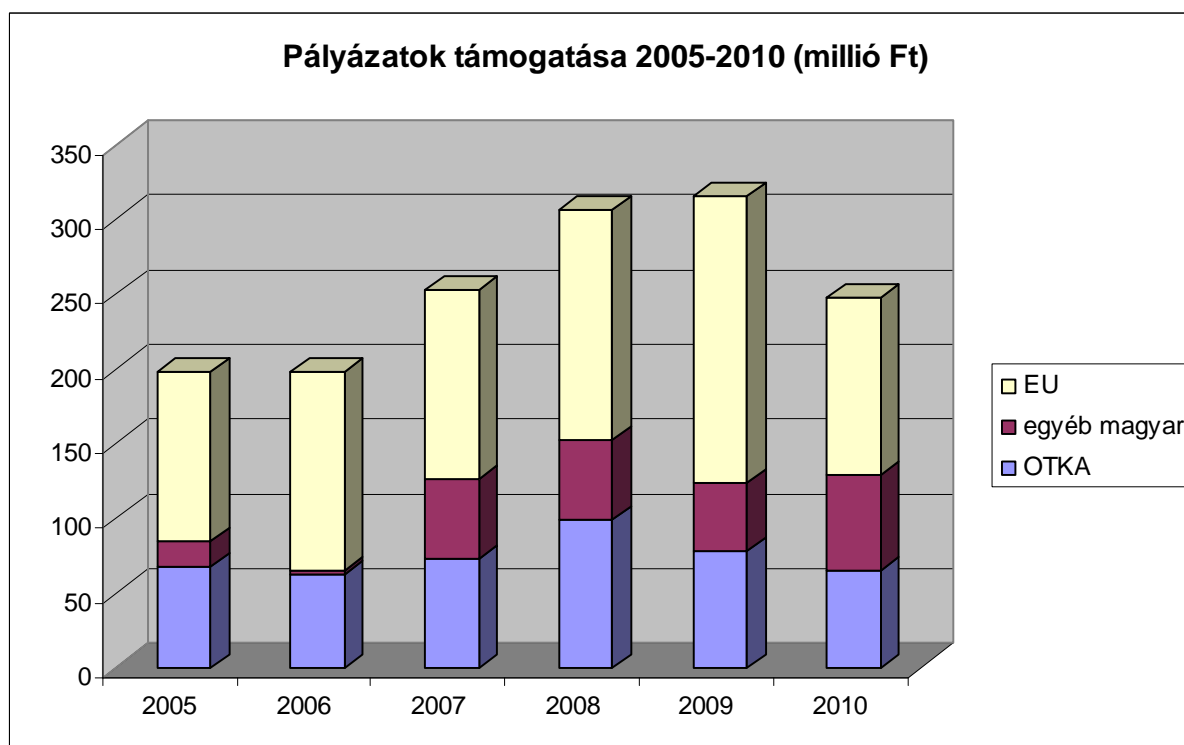
A 7. keretprogram új típusú pályázati elemeként jelentkező, a European Research Council ún. Starting Independent Researcher és Advanced Investigators Grant-jei egy-egy még kevésbé tapasztalt, ill. tapasztalt tudós vezetésével létrehozott kis kutatói csoportok kutatásainak segítségét célozzák meg hosszabb távra, jelentősebb, projektenként akár több millió eurós támogatással. Ennek megfelelően viszonylag kevés projektet támogatnak és igen nagy a verseny. Nagy sikernek könyvelhető el, hogy a 2008-ban nyertes PRIMEGAPS projekt után a 2010-es Advanced Investigators Grant fordulóban egy újabb, intézeti kutató által vezetett és több más munkatársat is magába foglaló projekt nyert támogatást. A támogatott kutatás a szerződés megkötése után, 2011 első felében indul, így természetesen anyagi támogatás is csak 2011-től érkezik.

Az intézet tagja egy német és dán kisvállalkozások vezette nemzetközi konzorciumnak, mely 2009-ben benyújtott és 2010-ben elnyert egy EU 7 „Research for the benefit of specific groups” típusú projektet „Comparative Genomics and Next Generation Sequencing” címmel. Az intézet végzi az új generációs szekvenciálási módszereket tartalmazó szoftverfejlesztés nagyobb részét. A 2010-ben megindult, közel két éves munka összes támogatása 600 ezer euró körül lesz.

Összességében, a csökkenő pályázati lehetőségek hatására az intézet 2010. évi pályázatokból származó bevétele, ahogy várható volt, lényegesen, 20%-ot meghaladó mértékben alatta maradt a 2009. évi pályázati bevételeknek. Az OTKA-tól érkező támogatások kis mértékben csökkentek, annak ellenére, hogy az intézet nyeri el a matematika támogatására jutó összegek nagyobb részét. Az egyéb hazai pályázati támogatások bevétele a két futó Lendület projekt eredményeként kis mértékben növekedett, a kifutó pályázatok miatt viszont az EU-ból származó nemzetközi pályázati bevételek drasztikusan, közel 40%-kal csökkentek. Így mindösszesen a 2010. évi bevételek az előző 3 év mindegyikénél kevesebbnek bizonyultak.

A futó Lendület, OTKA és EU-s, ill. a 2010. év végén elnyert, 2011-ben induló új EU-s pályázatok együttesen biztosítják, hogy 2011-ben ne csökkenjenek tovább a pályázati bevételek, ill. azok kisebb mértékű növekedése is várható. A további évekre az intézet pályázati sikeressége nagymértékben függ majd attól, hogy megnyílnak-e újabb magyar vagy nemzetközi pályázati lehetőségek.

A következő diagram mutatja a pályázati bevételek alakulását az elmúlt 6 év folyamán.



V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Ánh PN, Siddoway M: Divisibility theory of semi-hereditary rings. Proceedings of the American Mathematical Society, 138 (12): 4231-4242 (2010)
2. Bárány I, Blagojevic P, Szűcs A: Equipartitioning by a convex 3-fan. Advances in Mathematics, 223(2): 579-593 (2010)
3. Bárány I, Reitzner M: Poisson polytopes. Annals of Probability, 38 (4): 1507-1531 (2010)

4. Csiszár I, Talata Z: On rate of convergence of statistical estimation of stationary ergodic processes. *IEEE Transactions on Information Theory*, 56 (8): 3637-3641 (2010)
5. Elek G: Parameter testing in bounded degree graphs of subexponential growth. *Random Structures & Algorithms*, 37 (2): 248-270 (2010)
6. Elekes M, Keleti T, Máthé A: Self-similar and self-affine sets: measure of the intersection of two copies. *Ergodic Theory and Dynamical Systems*, 30 (2): 399-440 (2010)
7. Blomer V, Harcos G: Twisted L-functions over number fields and Hilbert's eleventh problem. *Geometric and Functional Analysis*, 20 (1): 1-52 (2010)
8. Major P: Estimation of multiple random integrals and U-statistics. *Moscow Mathematical Journal*, 10 (4): 747-763 (2010)
9. Miklós I, Mélykúti B, Swenson K: The metropolized partial importance sampling MCMC mixes slowly on minimum reversal rearrangement paths. *IEEE-ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics*, 4 (7): 763-767 (2010)
10. Némethi A, Popescu-Pampu P: On the Milnor fibres of cyclic quotient singularities. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 101 (2): 554-588 (2010)
11. Goldston DA, Pintz J, Yıldırım CY: Primes in tuples. II. *Acta Mathematica*, 204 (1): 1-47 (2010)
12. Smith JL, Barrett JE, Rejtő L, Tusnády G, Cary SC: Resolving environmental drivers of microbial community structure in Antarctic soils. *Antarctic Science*, 22 (6): 673-680 (2010)
13. Cilleruelo J, Ruzsa IZ, Vinuesa C: Generalized Sidon sets. *Advances in Mathematics*, 225 (5): 2786-2807 (2010)
14. Stipsicz A: Ozsváth-Szabó invariants and 3-dimensional contact topology. *Proceedings of the International Congress of Mathematicians, Vol. II.*: 1159-1178 (2010)
15. Ozsváth P, Stipsicz A: Contact surgeries and the transverse invariant in knot Floer homology. *Journal of the Institute of Mathematics of Jussieu*, 9 (3): 601-632 (2010)
16. Moser RA, Tardos G: A constructive proof of the general Lovász local lemma. *Journal of the ACM*, 57 (2): Paper Art: 11 (2010)
17. Weiner M: On orthogonal systems of matrix algebras. *Linear Algebra and its Applications*, 433 (3): 520-533 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	93	Ebből kutató ² :	72
PhD, kandidátus:	30	MTA doktora:	24
		Rendes tag és levelező tag:	12
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			18
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			6

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	167		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :	164		
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban magyarul:	1	idegen nyelven:	8
külföldi folyóiratban magyarul:	0	idegen nyelven:	109
Ebből impaktfakt. publ, térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	89
Könyv ⁸ magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹ magyarul:	0	idegen nyelven:	7

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	89,03	Összes független hivatkozás száma:	1665
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	2061		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	3	MTA doktora:	1
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :	218		
	posztterek száma:	1	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	17	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	114
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :	44		
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	14	PhD:	38

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	484,33	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	13	Teljes saját bevétel:	187,87 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			26
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	64,29	MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4,22 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	30	MFt	
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			6
EU forrásból:	6	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	118,82 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			25,55 MFt

SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

1111 Budapest, Kende u. 13-17.
telefon: 1-279 6000; fax: 1-466 7503
e-mail: sztaki@sztaki.hu; honlap: <http://www.sztaki.hu/>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutató Intézete (MTA SZTAKI) nemzetközi mércével mérhető alapkutatási eredményekre építi 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.

A magas szintű kutatási tevékenység elengedhetetlen velejárója a megfelelő *infrastruktúra*. Ennek szellemében 2010-ben feladatuknak tekintették egy korszerű *háromdimenziós virtuális környezetet* létrehozását. Meg kívánták kezdeni egy *korszerű irányítástechnikai kísérleti laboratórium* felállítását robotjárművek és UAV-k (unmanned aerial vehicles) robusztus, hibatűrő irányítási algoritmusainak kutatására és demonstrálására.

Az *EU VII. keretprogramjában* jól megválasztott területeken, a lehetőleg legerősebb, nyeresí eséllyel rendelkező konzorciumokban szándékoztak részt venni, olyan témákban, melyek esetén a hazai felhasználói háttér is biztosítottnak látszik.

Továbbra is kiemelkedő fontosságot tulajdonítottak legfontosabb ipari partnereiknek: GE Hungary ZRt, Paksi Atomerőmű Zrt, Hungary ZRt, AUDI Motor Hungaria Kft, Robert Bosch Kft, Knorr Bremse Fékrendszerek Kft.

Összhangban az európai kutatási térség kialakítását célzó törekvésekkel, folytatni kívánták *nemzetközi virtuális intézetek és laboratóriumok* kialakítását és működtetését.

Teljesítménynövelő hatást vártak a 2010 elején bevezetett belső ösztönzési rendszertől, mely a korábbiaknál is konkrétabb, mérhetőbb, a kutatásfejlesztési tevékenység különböző formáját célzottabban támogató elemekből áll.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Matematika és számítástudomány

A matematika és számítástudomány területén azokat a témákat kezelik súlypontilag, melyek megalapozhatják az informatika és az automatizálás jelenleg is nyitott, előtérbe került problémáinak megoldását. Így koncentrálnak például a komplex rendszerek modellezésére, elemzésére, beleértve például a nagyméretű (extremális) gráfokat, az adatbányászatot, a sztochasztikus rendszereket, az operációkutatást, az algebrai kutatásokat, illetve a biológiai motivációjú számítástudományt.

A számítástudomány egyik igen jelentős, mára már nagy hagyományúnak mondható irányzata a hatékony algoritmusok kutatása, fejlesztése. E téren folytatott kutatásaik közös vezérfonalát az elméleti hatékonysági garanciákkal rendelkező algoritmusok kidolgozására irányuló

törekvés adja. Vizsgálták mátrixok lineáris tereiben maximális rangú elem keresésének algoritmikus bonyolultságát. Egyik fontos eredményük egy determinisztikus, polinomidejű algoritmus arra az esetre, amikor a teret egy tetszőleges és több egy rangú mátrix feszíti ki. Polinomidejű kvantum-algoritmust adtak 2 osztályú nilpotens csoportokban a rejtett részcsoporthoz problémájának megoldására. A kombinatorikai nullahelytételt sikerült véges ponthalmazok helyett multihalmazok esetére általánosítani. Sikeresen foglalkoztak véges vektortérbeli lefogó ponthalmazokkal, valamint a Hilton-Milner tétel vektoros analogonjával.

Kombinatorikus számítástudomány, gráfelmélet kérdései a matematika több ágához és az alkalmazott kutatásokhoz (úgy mint informatika, kódelmélet, kriptográfia, optimalizálási, ütemezés, kommunikáció, hálózatok) is kapcsolódnak. Így a kapott elméleti eredményeknek gyakran vannak komoly következményei a mindennapi életben. Hálózatok domináló részeire vonatkozóan megvizsgálták, hogy néhány fontos strukturális tétel közül melyek terjeszthetők ki véges hálózatokról végtelenre, illetve melyek veszítik érvényüket. Gráfok optimális összegű számozásaira (ún. súlyozott színezés) halmazrendszerek segítségével adtak általános felső becslést, és pontos minimax tételt bizonyítottak, amely egyúttal a problémakörnek a klasszikus Perfekt Gráf Tétellel való kapcsolatára is rávilágít. A Regularitási Lemma alkalmazásával a Ramsey elméletben érték el új eredményeket. Jelentősek a perfekt gráf osztályok kiterjesztései és a Ramsey elméletet összekapcsoló eredményeik is.

Sztocasztikus rendszerek, pénzügyi matematika: folytonos idejű lineáris sztochasztikus rendszerek valós idejű becslésének egy pontos aszimptotikus jellemzését adták, ezzel megoldva egy, a 80-as évek óta nyitott problémát. Hibrid lineáris sztochasztikus rendszerek stabilitására fogalmaztak meg elégséges feltételeket. Bizonyítottan konvergens rekurzív becslési eljárást dolgoztak ki a pénzügyi idősorok elméletében központi jelentőségű GARCH modellekre. Ez utóbbiak identifikációjára hatékony numerikus eljárást fejlesztettek ki. Rejtett Markov folyamatok változásdetektálására alkalmazták az ún. Page-Hinkley detektort és éles becslést adtak a téves riasztás gyakoriságára. Kvantált Gauss AR(1) folyamat dinamikájának maximum-likelihood becslésére bizonyítottak éles aszimptotikus formulákat.

A biológiai motivációjú számítástudományi kutatásaik során bebizonyították, hogy minden rekurzíven felsorolható nyelv előállítható olyan szétszórt szövegfeltételekkel működő környezetfüggetlen grammatikával, amely legfeljebb két nemterminális szimbólummal rendelkezik. Az eredmény jelentőségét az adja, hogy megmutatja, hogy minden, a Turing géppel felismerhető nyelv előállítható olyan korlátozottan párhuzamos újraíró rendszerrel, amelynek ábécéje a nyelv ábécéjétől csak minimális számú új szimbólumban különbözik.

Az utóbbi évtizedek informatikai fejlődésének köszönhetően hatalmas mennyiségben állnak rendelkezésre a különböző természeti, társadalmi, műszaki folyamatokat jellemző mért és megfigyelt adatok, melyekből a statisztika és a gépi tanulás módszereivel rejtett információk is kinyerhetők. Stacionárius idősorok előrejelzésére több olyan módszert adtak meg, amelyek a nemparaméteres becslések és a gépi tanulási algoritmusok elveinek a kombinálásával univerzálisan konzisztensek. Korábban kifejlesztett UCT keresőalgoritmusuk továbbra is a számítógépes GO alapvető építőköve és meghatározó algoritmus maradt; a legjobb programok döntő többsége továbbra is ezen a módszeren alapul.

Elosztott számítási struktúrák, Grid rendszerek

A Grid rendszerek sokrétű kutatása során elért eredményeik közül a legfontosabbak:

- Továbbfejlesztették a 3G Bridge (Generic Grid-Grid Bridge) szolgáltatást, ami lehetővé teszi tetszőleges service grid (SG) és desktop grid (DG) rendszer integrálását. 2010-ben a

fő hangsúly az olyan irányú kiterjesztéseken volt, amik az SG→DG irányban történő jobboldal hatékonyabbá tételére és kiterjesztik az alkalmazható infrastruktúra típusokat. A továbbfejlesztés eredményeképpen egy nagyságrenddel növelték a 3G Bridge által egyidejűleg kezelhető jobok számát, lehetővé téve, hogy ne csak számítás intenzív, hanem adat intenzív alkalmazásokat is képes legyen támogatni. Fontos kiterjesztés volt a cloud rendszerekkel történő összekapcsolása is. Mindezek hatására az európai kutatóközösségen belül egyre inkább elfogadottá vált az a nézet, amit korábbi projekteknél az intézeti kutatók kezdeményeztek, hogy az olcsó és gazdaságos DG rendszerek hatékonyan alkalmazhatóak az SG rendszerek kapacitásának növelésére.

- A korábbi években kidolgozott és ma már a világ számos országában intenzíven használt P-GRADE grid portált jelentős mértékben továbbfejlesztették az ETH Zürich munkatársaival együttműködve. E munka eredményeképpen létrejött egy olyan, a proteomics kutatás támogatására specializált portál, amit az ETH Zürich biológusai napi gyakorlatban használnak. Együttműködést kezdtek a MoSGrid projekttel, amely több száz kémikus számára állít fel grid rendszert Németországban. Ehhez a projekthez kapcsolódóan elkészítették a WS-PGRADE portál új verzióját, ami jelentősen javította a portál biztonságtechnikai megoldását. Ugyancsak a németországi projekt igényeinek megfelelően integrálták a WS-PGRADE portált a Unicore grid rendszerhez is. Elvégezték a WS-PGRADE portál integrálását Eucalyptus és Amazon EC2 cloud rendszerhez. Mindezek eredményeképpen a WS-PGRADE portál Európa egyik legkorszerűbb portálja lett, ami minden, Európában alkalmazott elosztott infrastruktúra elérését és használatát képes biztosítani.
- A magyar Web2Grid projekt keretében kidolgoztak egy olyan, web 2.0 közösségeket támogató keretrendszert, melynek segítségével a közösség tagjai alkalmazásaikat a saját desktop gépeikből összeállított desktop griden tudják futtatni.

Sok ezer processzoros számítógépek

Hagyományaik szerint úttörő jellegű szerepet játszanak a celluláris érzékelő és hullám számítási rendszerek terén, ahol – környezetünkben elég ritka módon – az algoritmikus kutatásokon túlmenően az új architektúrák áramkör-tervezéséhez is hozzájárulnak.

- Új elméleti eredmények születtek a sok ezer processzoros számítógépek, valamint a téridőbeli dinamika területén:
- A sok-processzoros számítógép architektúrák FPGAs implementációjában új particionálási módszer készült a memóriák, a processzorok elemek, illetve a kontrol egységek optimális számának, illetve arányának meghatározására. Továbbá sikeres kísérletek folytak az adat- és a kontrol buszok összevonására, miáltal egyszerűbb adatvezérelt architektúrák készültek.
- Az 1D bináris celluláris automaták területén bevezetésre került az időben változó input és határfeltétel, amely teljesen új dinamikai elemek megjelenéséhez vezetett.
- Bizonyítást nyert, hogy az 1D celluláris automatákban megjelenő Éden Sziget a Gödel nemteljességi tételének a legegyszerűbb megjelenési formája.
- Hologram pozicionáló szervo készült a fázis kódolt holografikus adattároló rendszerhez.
- CMOS technológiájú THz tartományban működő érzékelőket fejlesztettek ki.
- Elkészült az első prototípusa az ivóvíz minőségét automatikusan vizsgáló színes digitális holografikus mikroszkópnak. Az eszköz, ami a rajta átfolyó vízben azonosítja a különböző algákat, moszatokat és férgeket, alkalmazásra került a Fővárosi Vízművek laboratóriumában a budapesti ivóvíz folyamatos ellenőrzésére.

Az internet következő generációi; adatbányászat és információ-visszakeresés

Az elosztott rendszerek témakörben 2010-ben Web-alapú hálózati szoftvertechnológia kutatásokra és kísérleti fejlesztésekre, így digitális könyvtári rendszerek és szolgáltatások kialakítására, csoportszoftver és környezeti intelligencia fejlesztésekre koncentráltak:

- Az ön-adaptív szolgáltatás orientált rendszerek területén, és az SLA (service level agreements) területeken értek el új eredményeket.
- A *BREIN (Business objective driven reliable and intelligent Grids for real business)* EU FP VI nemzetközi projekt keretében alap- és alkalmazott kutatási eredményeket értek el a Grid témakörben ontológia építés, szolgáltatás integrációs modell és módszertan kialakítás területein. Elsősorban szemantikus web-technológiák segítségével oldották meg web-szolgáltatások SLA kezelését, az ágens-technológia alapú grid/cloud szolgáltatások monitorozását és erőforrás adaptációját.
- A CrossMedia nevű, 2 évre tervezett, belső finanszírozású projekt elosztott számítást és fejlett jelfeldolgozást támogató, szemantikus keresőfelülettel rendelkező adattároló, processzáló és kiszolgáló hálózati szolgáltató rendszer prototípusának kifejlesztését célozza. A létrejövő hálózati szolgáltatás alkalmas multimédia adatfolyamok tárolására és tartalom alapú feldolgozására. Az adattárolókon archivált, eseményekkel annotált adatfolyamok különféle szűrőalgoritmusok automata futtatása után válnak kereshetővé a rendszerhez kapcsolódó webes felületen keresztül.

Web Spam szűréssel kapcsolatban is a világ legerősebb kutató helyei közé került az intézet. A kutatás nemzetközi elismertségét jelzi, hogy az *ECML/PKDD 2010 konferencia Discovery Challenge* feladatának az Internet archívumok számára nyújtott tartalom minőség-előrejelzését választották, és az MTA SZTAKI-t kérték fel a rendezvény szervezésére. Az International Internet Preservation Consortium (IIPC) a 2010. év során elkezdte az MTA SZTAKI Web spam szűréssel kapcsolatos eredményeinek alkalmazását.

A Magyar Telekom által létrehozott "Alapítvány a távközlési és telematikai felsőoktatásért" társadalmi szervezet a 2010/11 akadémiai évben 30MFt összeggel támogatta Üzleti Intelligencia, Adatbányászat és Webes Keresés témájú, az alapkutatástól az ipari hasznosításig ívelő kutatásaikat. Az első félévi tevékenységük főbb eredményei:

- Többmagos architektúrák alkalmazása multimédia információkeresési feladatok megoldásában.
- Szöveges rangsorolás és a keresőkifejezés nehézségi mértékeinek tanulása.
- Gráfalgoritmusok alkalmazása egy ügyfélkapcsolatokat megjelenítő eszközben.

Az információkereső, rangsoroló eljárások minőségének tekintetében jelentősen továbbfejlesztették magyar képi információkereső rendszerüket. A rendszer magába integrálja mind a képi, mind a természetes szöveg alapú módszereket és többek között tartalmazza a képi szegmentáció és jellemzőválogatás hatékony implementációját.

Az újonnan alakult nyelvtechnológiai csoport az ember-gép kommunikációhoz szükséges összes technológia kutatását és fejlesztését céljának tekinti, ideértve a szószintű (szótövezés, morfológiai elemzés, helyesírás-ellenőrzés, szótári támogatás), a mondat szintű (mondatelemzés, generálás, kérdés-megválaszolás) és a párbeszéd-szintű (információ-kinyerés, szemantikus keresés, dialógus-kezelés) technológiákat is.

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.

Földi és légi járművek irányítása, a járműiparral kapcsolatos kutatásfejlesztés

Az automatizált irányítási rendszerek elméleti és módszertani hátterét a *rendszer- és irányításelmélet* adja. Alapkutatásaikban megalapozzák mind a folytonos, mind a diszkrét rendszerek terén végzett kutató-fejlesztő tevékenységüket. Eredményeiket elsősorban az energia- és a járműipar, valamint a termeléssel foglalkozó vállalatok és azok nemzetközi hálózatai hasznosítják, de sikeresek például orvosi alkalmazásaik is.

A rendszer- és irányításelmélet terén a következő kiemelendő elméleti eredmények születtek:

- A nemlineáris rendszerek irányításelméletéhez kapcsolódva az időinvariáns geometriai rendszerelmélet módszerkészletét kiterjesztették állapotfüggő paraméterű lineáris modellstruktúrákra (LPV és qLPV modellek) is. Az LPV és qLPV modellosztályokkal leírható irányítási feladatok dualizálásával fontos eredményeket kaptak hasonló rendszerekre vonatkozó szűrési és detektálási feladatok megoldásában. Új eredmények jöttek létre az átkapcsolást végző (switching) rekonfiguráló irányítórendszerek különböző osztályainak vizsgálatára is.
- A qLPV és LPV modellekre alkalmazható LMI alapú irányítás-tervezési stratégiák közé koncepcionálisan beemelték a TP modell transzformációt. Kiterjesztették a TP modell transzformációt időkéséses rendszerekre, oly módon, hogy lehetőség nyílik időkéséses rendszereket időkésés nélküli paraméterben megjelenő időkéséses qLPV modellé alakítani. Ezzel gyakorlatilag az időkésés nélküli tervezési stratégiák egy részét hatékonyan lehet alkalmazni időkéséses rendszerekben.
- A racionális ortogonális bázisok továbbfejlesztéseként létrejövő hiperbolikus wavelet konstrukciók - a jel- és rendszermodellezési, valamint rendszeidentifikációs alkalmazási lehetőségek mellett - utat nyitnak az indefinit metrikájú rendszerek leírása, ezen keresztül egy hiperbolikus rendszerelmélet megalkotása felé; ezek elméleti megalapozása, továbbá fizikai, műszaki és orvosbiológiai rendszerekben való alkalmazási lehetőségeik az elmúlt időszak és a jelen kutatásainak tárgya.
- Az adaptív, robusztus kontroll területén egy újszerű kevert modellt vizsgáltak, ahol a probléma jól modellezhető részét egy sztochasztikus Markov-modell írja le, az ismeretlen részt pedig egy tetszőlegesen változó jutalomfüggvény modellezi. A probléma különböző változataira a ma ismert legjobb algoritmusokat dolgozták ki arra a valós esetre, amikor a környezet és a jutalomfüggvény csak az aktuális állapotban megfigyelhető.

Az intelligens gépjármű-irányítási kutatások mind a hazai autóipar, mind az egyre fontosabbá váló logisztika szempontjából kiemelkedő fontosságú téma. A TRUCKDAS projektben végzett tevékenység az intelligens járműirányítási kutatásokban hozott új eredményeket. A korszerű járműfedélzeti irányítórendszerek hibátűrő kialakításának tervezése, a jármű flották koordinált irányítása, az intelligens, vezető nélküli járműirányítási megoldások, a szenzorfüziós módszerek alkalmazása és az elektronikus fék és kormány alkalmazásának integrált módszerei adják a kutatás fő irányait. Módszerek kerültek kidolgozásra oszlopban haladó haszonjárművek irányítására annak érdekében, hogy az irányítási célok a járműoszlop menetstabilitásának biztosítása mellett minél kisebb üzemanyag felhasználásával legyen megvalósítható. Ezek az eredmények mind az egyedi járművek, mind a járműflották hatékony és gazdaságos üzemeltetéséhez járulnak hozzá.

Robotrepülőgépek terén az előző években életre hívott kísérleti laboratóriumban a korszerű repülésben alkalmazható navigációs berendezések és az autonóm mozgást megvalósító

szabályozó rendszereket kutatták. A meglévő tapasztalatok felhasználásával megkezdődött egy átfogó koncepció kialakítása, mely műszaki alapot kíván teremteni a robotrepülőgépek széleskörű polgári elterjedése számára. A kutatás a nagy megbízhatóságú vezérlőrendszerek és a repülési vészhelyzetek felismerésére kifejlesztett érzékelő rendszerek összekapcsolása által lehetőség teremt a robotrepülőgépek közös légtérbe történő integrációjára. Vezetőnélküli légi járművekkel végzett valós idejű légi megfigyelés támogatására földi objektumok követésére alkalmas több-célpontú követőrendszert hoztak létre. Algoritmust dolgoztak ki repülő objektumok szegmentálására, kiegészítve ezt egy alacsony szintű képi és videó tartalmi leírók magasabb szintű értelmezésén és fúzióján alapuló felismeréssel.

Az intézet korábbi kutatásai során szoros együttműködést alakított ki számos, a repülőgépes technológiák kidolgozásában érintett kutató-fejlesztő intézettel, iparvállalattal és egyetemmel. Ezen kapcsolatok révén, alapvetően az *Airbus repülőgépgyártó* fejlesztési igényeit kielégítendő és a köré tömörülve, jött létre 8 európai partner közreműködésével az *ADDSAFE* elnevezésű FP7 projekt, amelyhez az intézet új, jelenleginél hatékonyabb repülőgép-gyártási technológiák kidolgozásához hibadetektálási módszerek kifejlesztésével és alkalmazásával járul hozzá.

A járműiparral is kapcsolatos termelésirányítási kutatások eredményeit a következő fejezet tartalmazza.

Mérnöki és üzleti intelligencia; összetett termelési és ellátási rendszerek irányítása

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 *valós idejű* kezelésére, különös tekintettel az *informatika*, az *operációkutatás* és a *tudásalapú módszerek* legújabb irányzataira, egyensúlyt teremtve az *optimálás*, *autonómia* és *kooperáció* terén. 2010-es főbb eredményeik:

- Az erőforrás (tipikusan gépoperátor) használatot szintező problémára adtak egzakt algoritmust. A célfüggvény, amely az erőforrás használat szintjét méri, egy széles függvénycsaládból kerülhet ki, tipikus példák a lineáris vagy kvadratikus célfüggvény.
- Polinomiális idejű algoritmust adtak a megszakításos open-shop probléma azon változatára, ahol a gépek két csoportra osztottak, és a műveletek vagy egyedi gépeket, vagy egy gépcsoport összes gépét igénylik egy gépcsoporton belül.
- Új, oszlopgeneráláson alapuló módszert dolgoztak ki a kiegyensúlyozott hozzárendelés (load balancing) problémára.
- Folytatták korábbi kutatásaikat, melyek termelési hálózatokban megvalósítható, gyakorlatba is átültethető kooperációs modellek kidolgozására irányultak. A 2010-ben kiváló minősítéssel lezárult AC/DC, integrált európai autóipari K+F projekt keretében kidolgozott koordinációs tervezési mechanizmus hozzájárult a beszállítói lánc mentén mind a szállítási idők, mind a készletek jelentős csökkentéséhez. A tervezési módszer alapelve az együttműködésből adódó előnyök és kockázatok megosztása.
- Adatbányászati eljárásokat fejlesztettek ki nagyméretű termelésinformatikai adatbázisokban tárolt, hibás és zajos adatokat is tartalmazó adattömeg tisztítására, termelésoptimalizációs céllal.

A témakörrel kapcsolatos alkalmazott kutatásfejlesztés jó része a 2010-ben az intézetben megalakult Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és –informatika Projektközpont keretében folyik. Az alapkutatási eredményeket a SZTAKI kutatói 5 sikeresen lezárt ipari projekt keretében vitték át a gyakorlatba. A szerződéses ipari partnerek között található az

Audi Hungaria Motors, Knorr-Bremse Fékrendszerek Kft, Andritz Kft és a Bosch Rexroth Pneumatics Ltd. A Bosch Rexroth cég egri gyárában bevezetésre került a SZTAKI által kifejlesztett ütemező rendszer, melynek általános jellege és szabványkövető interfészei miatt várhatóan további bevezetések is várhatók. A Projektközpont német és magyar partnerintézetei már több futó EU-s projektben is részt vesznek. A Projektközpont több száz, Magyarországon működő cégnek küldött felkérő levelet a hazai termelő és logisztikai vállalatok termelésirányítási és termelésinformatikai helyzetének és jövőbeli igényeinek felmérésére kialakított internet-alapú kérdőív kitöltésére. A válaszok kiértékelése jelenleg is folyik, melyet célzott látogatások és műhelytalálkozók fognak követni.

Külön kiemelkedő a SZTAKI és a *HITACHI* cég kutatás-fejlesztési együttműködése, melynek kapcsán az intézet munkatársai folytatják közreműködésüket a japán cég számítógépes merevlemez részegységeket gyártó kaliforniai, japán és Fülöp szigeteki gyárainak termelésirányítási rendszereinek fejlesztésében, termelőrendszerek viselkedésének adaptív előrejelzése témakörében. 2010-ben az együttműködése kiterjedt egy új iparágra, az energetikai gépek és berendezések gyártására. Új gyártásütemezési módszerek kerültek kifejlesztésre, melyek lehetővé teszik alternatív gyártási útvonalak adta lehetőségek kihasználását a gyártóberendezések egyenletes terhelése és az átfutási idő csökkentése érdekében. Az új módszereket sikeresen tesztelték nagyméretű (több ezer gyártási műveletet felölelő, mintegy negyed éves horizontú) ipari feladatokon.

A számítógéppel integrált gyártás terén kutatásaik súlypontját a kiterjesztett/virtuális vállalatok kapcsolata képezte: olyan életciklus, ill. szolgáltatás tervező módszereket dolgoztak ki, melyek tekintetbe veszik a környezeti szempontokat és a társadalmi elvárásokat is. A MANUFUTURE-HU technológiai platformban a nemzetközi trendek vizsgálatával, a hazai lehetőségek feltárásával foglalkoznak, és jelentős hazai és nemzetközi szerepünk van a majdani irányok megadásában.

Számítógépes képfeldolgozás, dinamikus objektumok 3D megjelenítése és rekonstrukciója

A geometriai modellezés és számítógépes látás területén elért eredmények közül kiemelendők:

- A korábban kifejlesztett perspektív autokalibrációs és 3D rekonstrukciós eljárást kiterjesztették változó fókusz távolságú kamerákra.
- Megmutatták, hogy mind a gyengén perspektív, mind a skálázottan ortonormális kamerára legkisebb négyzetes értelemben optimális kalibrációs algoritmus készíthető.
- Kifejlesztettek digitális kamerákra egy új radiometrikus kalibrációs módszert projektor-kamera rendszerekhez, amely a szuperpozíció elvén alapul.
- A fényvonalak korrekcióján alapuló formatervezési módszert jelentősen továbbfejlesztették, aminek eredményeképpen az alkalmassá vált kiterjedt felülethibák és bonyolult topológiájú fényvonal struktúrák kezelésére.

A távérzékelés kutatásában előrelépést jelent, hogy új, jelölt Markovi pontfolyamaton és egy új, jellemző-pont leírási algoritmuson alapuló eljárásokat hoztak létre épületek és változásaik együttes detektálására regisztrált légi- és műholdképeken.

Többkamerás megfigyelő rendszerekhez új lokalizációs eljárásokat dolgoztak ki:

- Új statisztikai eljárást adtak ismeretlen alakú, akár takarásban levő objektumok lokalizációjára kamera-kalibráció használata nélkül;

- Dinamikus optimalizációs elvek alapján működő új módszert fejlesztettek ki a tömegben mozgó, részben egymást takaró személyek pozícióinak megtalálására és magasságuk becslésére.

Új eljárást dolgoztak ki vizuális információ általános kategorizálására lokális képi látványt, valamint struktúrát leíró alacsony szintű képi jellemzők egységes modellbe integrálásával. A hiányos és zajos adatok kezelésére új, páros gráfokon alapuló csoportosítási eljárást adtak. Felépítettek egy 3D CAVE - immerzív 3D virtuális laboratóriumot, melyben lehetőség nyílik bonyolult rendszerek szimulálására és tervezésére. Elkezdték a mozgó, változó objektumok 3D rekonstrukcióját szolgáló 4D stúdió építését. A stúdió összes főbb hardver és szoftver komponense elkészült.

A hagyományos és a megújuló energiaforrások automatizálási, informatikai problémái

A rendszer- és irányításméleti kutatások részben az energiatermelés automatizálására irányulnak. A biztonságkritikus folyamirányítás területén meglévő magas szintű elméleti háttérre építve konkrét alkalmazásokat valósítottak meg hagyományos stratégiai partnerüknél, a Paksi Atomerőműben. Az installált rendszerek és a kapcsolódó szakértői tevékenység hozzájárul az erőmű biztonságos és gazdaságos üzemeltetéséhez. Az intézet részt vesz az atomerőmű meglévő 4 blokkja irányítástechnikai rendszereinek üzemidő hosszabbítását előkészítő szakértői tevékenységekben. Ennek során felülvizsgálják a jelenlegi rendszereket az élettartam-gazdálkodás és a hosszú távú továbbüzemeltetés feltételeinek szempontjából. Közreműködnek a hamarosan felújításra kerülő Szabályzó és Biztonságvédelmi Rendszer (SzBVR) rekonstrukciójának előkészítésében, a szállítandó új rendszerrel szembeni követelmények meghatározásában és a szállítók ajánlatainak értékelésében. Folytatják az erőmű folyamatirányító rendszereinek számítógép-, adat- és hálózatbiztonsági felmérését, a biztonságot veszélyeztető hiányosságok feltárását és az erőmű új információbiztonsági rendszerének előkészítését is.

Jelentős eredményeket értek el a Paksi Atomerőmű RT. részére fejlesztett alállomási, intelligens döntéstámogató rendszerük kapcsán a biztonság és egyúttal a mérnöki/kezelői sebesség növelése tekintetében. Rendszerük második verzióját és a sínbontó miatt szükséges módosításokat sikeresen üzembe helyezték. A 400/120 kV-os alállomás tréning-szimulátora a SZTAKI vezetésével készült el számos alvállalkozó segítségével.

Optimalizáción alapuló eljárást fejlesztettek ki nemlineáris pozitív rendszerek egy széles osztálya, a reakciókinetikai hálózatok legsűrűbb, és legkritikább realizációinak meghatározására. Módszert adtak a fenti rendszerosztály formális egyszerűsítési transzformációinak alakjára úgy, hogy az egyszerűsítés megtartsa a dinamikai strukturális tulajdonságokat (pl. a stabilitást), így a bonyolult biokémiai reakcióhálózatok dinamikus analízise egyszerűbbé válhat. A nemlineáris folyamatrendszerek modellezése és irányítása területén elért elméleti eredményeknek a Paksi Atomerőmű irányítástechnikai rekonstrukciójában lehet komoly gazdasági haszna. Itt az egyes szabályozóköri modell alapú felügyelt működtetése, valamint a normál üzemi fel- és leterhelési műveletek optimális irányítási stratégiájának kidolgozása hozhat komoly eredményeket.

A Siemens Corporate Research számára egy belső pontos algoritmuson alapuló optimalizáló motort fejlesztettek ki. A kifejlesztett szoftvert jelenleg nagyméretű elektromos energiahálózati optimalizálási feladatokon tesztelik.

A 2011 tavaszán lezárandó EU-VII-es ReliaWind projekt célja új működtetési, karbantartási, és tervezési technológiák kifejlesztése szél erőművek megbízhatóságának növelésére. Ezen belül a hibadetektálás és –prognózis, valamint a karbantartás-tervezés területén végeztek kutatásokat. A projekt kiemelkedő eredménye szélturbinák és turbinafarmok állapotfelügyeleti és karbantartás-tervező rendszerének (WindMT) kifejlesztése. Az ütemezési modell a karbantartási műveletek összes fontos, az alkalmazási területre jellemző követelményét figyelembe veszi, pl. időjárás, speciális eszközök és bérelt szolgáltatások elérhetősége, emberi erőforrások képzettsége, illetve az egyes műveletek hatása a szélturbina vagy a szélfarm működésére. Az ütemezési feladat megoldására egy matematikai programozási módszereket és speciális heurisztikákat ötvöző algoritmust dolgoztak ki. A rendszer továbbfejlesztéséről és jövőbeli alkalmazásáról az iparág egyik vezető európai gyártójával tárgyalnak.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A SZTAKI által művelt kutatási területek összhangban vannak a világ előtt álló nagy kihívásokkal (*big challenges*). Az informatika lehet a kihívásokra adandó válaszok egyik hajtómotorja, az intézet által kiemelten kezelt K+F területek, mint a járműiparral kapcsolatos mechatronikai kutatások (elektromos jármű és járműirányítás), vagy mint a hagyományos és megújuló energiaforrások automatizálási és informatikai problémái pedig közvetlenül kapcsolódnak a kihívásokhoz. Természetes módon, a tématerületek harmonizálnak az *EU kiemelt K+F programjaival*, elsősorban az Information and Communication Technologies; Nanosciences, Nanotechnologies, Materials and new Production Technologies; Energy, Transport (including Aeronautics) programokkal.

Az *Új Széchenyi Terv* az egész gazdaság szempontjából prioritással kezeli a mobilitás, járműipar, és a logisztika; az informatika és a számítástechnika; és az új energetikai és környezetvédelmi fejlesztések K+F+I témaköröket. A termelésmenedzsment és –informatika területen létrejött *Fraunhofer – SZTAKI* kooperáció célja az elméleti kutatásokon alapuló alkalmazott kutatási eredmények ipari hasznosítása nemzetközi együttműködés keretében.

Hazánk városainak, tájainak megismertetését támogatja új generációs *mobil turisztikai rendszerük*, mely a CeBiT - en elnyerte az Európai e-Kiválóság Díj arany fokozatát (*European Seal of e-Excellence*), amelyet az Európai Multimédia Fórum (EMF) ítelt oda. Az MTA SZTAKI internetes szótár szolgáltatása 15 éve áll a felhasználók rendelkezésére, és időközben a leglátogatottabb magyar internetes on-line szótárszolgáltatássá vált. Naponta 100-140 ezer látogató végez több mint 1-1,2 millió lekérdezést. A tudomány társadalom iránti nyitottságát erősítették kutatóik, amikor jelentős számú tv- és rádióriportot adtak eredményeikről, minden alkalmat megragadtak azok megjelentetésére az írott sajtóban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Nemzetközi kapcsolatok

Kiemelkedően szerepeltek az EU VII. Keretprogramjában, ahol eddig 24, támogatást nyert projektben résztvevők, jó néhány esetben konzorciumvezetői szerepet is ellátnak. A programok keretében Európa legkiválóbb cégeivel dolgoznak együtt az informatika-, az autó-, az energia- és a repülőgépgyártás területéről.

Összhangban az európai kutatási térség kialakítását célzó törekvésekkel, folytatják nemzetközi virtuális intézetek és laboratóriumok kialakítását és működtetését. Több éves előkészítő munka és kutatási együttműködés eredményeként 2010 májusában ünnepélyes keretek között megalakult az intézet keretein belül működő „Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és –informatika Projektközpont”. A két fél egymást részben átfedő, részben kiegészítő kutatás-fejlesztési és konzultációs potenciálja egyedi lehetőséget nyújt mind kellő hatékonyságú kutató-fejlesztői tevékenység végzésére, mind az eredmények gyakorlati átültetésére, határainkon belül és kívül egyaránt. Várakozásuk szerint a Fraunhofer-Társaság széleskörű elismertsége jelentős segítséget nyújt az MTA SZTAKI-nak – és a Projektközponton keresztül más akadémiai kutatóintézeteknek és az egyetemeknek – a közép-európai, különösen a német tulajdonú vállalatokkal történő kapcsolatfelvételben, és K+F együttműködés kialakításában.

A SZTAKI közelmúltjában egyedülállóan sikeresek a japán RICOH, illetve HITACHI cégekkel folytatott K+F együttműködések. Előkészületek folynak hasonló keretszerződések aláírására a Bosch-sal és a szélerőműveket gyártó spanyol GAMESA céggel.

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.

Hazai kapcsolatok, részvétel a felsőoktatásban

Az intézet az informatika és más tudományágak (anyag-, élet- és társadalomtudomány, matematika, mesterséges intelligencia, rendszer- és irányítástechnika, automatizálás, operációkutatás) és felhasználási területek (érzékelő 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.

Projektjeikben olyan kiemelkedő szerepet betöltő nagyvállalatokkal működnek együtt, mint a GE, Audi, Magyar Telekom, MOL, Paksi Atomerőmű, Knorr Bremse, Bosch, ugyanakkor a kisvállalati résztvevők biztosítékot jelentenek arra, hogy eredményeik a lehető legszélesebb körben terjedjenek el.

Az egyetemi graduális is posztgraduális oktatást az intézet továbbra is a kutatási tevékenység fontos velejárójaként és a jövőépítés elengedhetetlen feltételeként kezeli. Rendszeres oktatási tevékenységet folytatnak a következő hazai felsőoktatási intézményekben: BME, ELTE, CORVINUS, Pannon Egyetem, PTE, ME, PPKE, CEU. 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 az 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 25 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.

Az intézet által szervezett legjelentősebb tudományos konferencia 2010-ben a 19th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems (MTNS 2010), Budapest, 2010. július 5-9. volt, mintegy 450 résztvevővel.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2010-ben is jelentős számú, hazai, illetve nemzetközi pályázati projektjük indult, melyek során többségében kiemelkedő egyetemekkel, kutatóintézetekkel és több esetben világhírű cégekkel dolgoznak együtt (zárójelben a SZTAKI-s témavezetők nevei és a projektek főbb adatai, beleértve az intézet által a teljes időszakra elnyert támogatás mértékét is):

LAWA: Longitudinal Analytics of Web Archive Data (FP7, 2010-2013)

Új Web alkalmazások számára feltárják az Internet méretével, eloszlásával, szerkezetével és evolúciójával kapcsolatos információkat. Kísérleti környezetet hoznak létre nagyléptékű, heterogén Web vizsgálatok céljaira, hangsúlyozva az infrastruktúra fenntarthatóságát, skálázhatóságát, és a gyűjtő, lekérdező és elemző modulok könnyű használhatóságát.

SCIIMS: Strategic Crime & Immigration Information System (FP7, 2010-2013)

A projekt a következő kutatási témákat érinti: információ-kezelési technikák fejlesztése és alkalmazása, biztonságos információs infrastruktúra. Informatikai eszközök kidolgozása és alkalmazása, amelyek az emberkereskedelem és az embercsempészet, illetve a szervezett bűnözés elleni rendőri munka során elemzéssel és előrejelzéssel segítik a döntéshozatalt.

EDGI: European Desktop Grid Initiative (FP7, 2010-2012)

Az intézet által koordinált projekt célja az EDGeS projektben elért service grid – desktop grid integrációs eredmények konszolidálása, a technológia továbbfejlesztése és kiterjesztése további service gridekre és számítási felhőkre. Feladatuk a technológia teljesítmény optimalizálása és kiterjesztése számítási felhőkre.

SHIWA: Interoperable Workflows for large-scale scientific simulations on Available DCIs (FP7, 2010-2012)

Az intézet által koordinált projekt célja, hogy az Európában legelterjedtebb workflow rendszerek együttműködési lehetőségét megteremtse. Elsődleges feladatuk a SZTAKI által kifejlesztett P-GRADE workflow rendszer beillesztése a SHIWA által kifejlesztendő technológiába és infrastruktúrába.

HP-SEE: High-Performance Computing Infrastructure for south East Europe's Research Communities (FP7, 2010-2012)

A HP-SEE projekt a régióban már meglévő, valamint a közeljövőben tervezett High-Performance Computing (HPC) infrastruktúrák összekötésével egy közös infrastruktúra kiépítését végzi. Emellett célja megnyitni a térség HPC centrumait a szélesebb felhasználói közösségek számára, főként fizika, kémia és élettudományok kutatási területeken.

DEGISCO: Desktop Grids for International Scientific Collaboration (FP7, 2010-2012)

A szintén a SZTAKI által koordinált projekt arra irányul, hogy az EDGeS projektben kidolgozott kutatási eredményekre alapozva kiterjessze az egymással együttműködő szolgáltatás és Desktop Grids-ből kialakított európai kutatási infrastruktúrát az EU-n kívüli partnerországok bevonásával.

EGI-INSPIRE: Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe (FP7, 2010-2013)

A korábbi EGEE projekt folytatásaként, grid oktatás és alkalmazás fejlesztés támogatása.

ADVANCE: Advanced predictive-analysis-based decision-support engine for logistics (FP7, 2010-2013)

A SZTAKI által vezetett projekt célja vállalatok kooperatív hálózatai számára olyan módszerek kidolgozása, melyek a működési adatok elemzése, döntéstámogatás és az általában csak lokálisan jelenlévő adatok hálózati megosztása révén hozzájárulnak a résztvevő cégek hatékonyságnöveléséhez.

APIS: Array passive ISAR adaptive processing (EU EDA JIP-ICET, 2010-2012)

Demonstrátor tanulmányozása és elkészítése ISAR radarképek szintézisére és feldolgozására. Autófókusz technikák implementálása kontrasztoptimalizációs módszerekkel. Képi rekonstrukciós eljárások tesztelése. Célpontok követése, leírása és felismerése ISAR képsorozatokon. Földi, légi és űrbeli platformok számításba vétele a megoldás során.

QC2_CORN: Quantifiable, Closed Quality Control, QC² (CORNET, 2010-2012)

A projekt célja olyan struktúrák és módszerek azonosítása és kifejlesztése, amelyek támogatják a cégeket, hogy jobban kézben tarthassák, irányíthassák a folyamat, a termék, illetve a termelési rendszer minőségével kapcsolatos tevékenységüket.

ManuCyte: Self-learning modular manufacturing platform for flexible, patient specific cell production (FP7, 2010-2013)

Moduláris, öntanuló gyártórendszer kifejlesztése specifikus sejtek rugalmas tenyésztéséhez.

CIS3D: Completeness Inspection in 3D (EU-EUREKA-EUROSTARS, 2010-2012)

A CIS3D projekt egy újfajta kamerás-számítógépes háromdimenziós (részben) ipari mérőberendezés-család rendszerszintű kidolgozását célozza. A háromdimenziós képelemzés eredményeképpen kimutathatók például alkatrészek hiánya mutatható ki.

MANUCLOUD: Distributed Cloud product specification and supply chain manufacturing execution infrastructure (FP7, 2010-2013)

Elosztott számítástechnikai felhő-infrastruktúra kifejlesztése termék specifikációhoz és termelési ellátó hálózat irányításához.

OTKA-OMFB: Jelentésalapú nyelvtechnológia (2010-2013)

Céljuk a szemantikus alapú nyelvtechnológia kifejlesztése kezdve a szószinten (lexikai szemantika) majd később a munkát kiterjesztve összetettebb nyelvű egységekre is (frázis, mondat, bekezdés, dokumentum).

OTKA 80352: Koherens tulajdonságrendszerek a mesterséges és az emberi látásban (2010-2012)

A projekt keretében olyan módszerek kutatása folyik, amelyek alkalmasak alakzatok, tulajdonságok, szituációs összefüggések, geometriai szerkezetek és az ezek közti strukturális, oksági vagy valószínűségi kapcsolatok keresésére, a pillanatnyi mérés adatait folyamatosan összevetve a hasonlóknak mutatózó esetekkel.

OTKA 83438: Értelmezett videó-tartalmak indexelése és visszakeresése (2010-2013)
Vizuális tartalom-adatbázisokkal kapcsolatos új indexelési, releváns leíró keresési, hatékony visszakeresési és vizualizációs megoldások kutatása, magas szinten értelmezett videó tartalmak kereséséhez.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Vámos T: Knowledge and computing: a course on computer epistemology. Budapest, New York: CEU Pr., 218 (2010)
2. Baatar C (szerk.), Porod W (szerk.), Roska T (szerk.): Cellular nanoscale sensory wave computing. New York: Springer, 249 (2010)
3. Antos A, Grover V, Szepesvári C: Active learning in heteroscedastic noise. Theoretical Computer Science, 411: 2712-2728 (2010)
4. Bacsó G, Jung, H, Tuza Z: Infinite versus finite graph domination. Discrete Mathematics, 310 (9): 1495-1500 (2010)
5. Bozóki S, Fülöp J, Rónyai L: On optimal completions of incomplete pairwise comparison matrices. Mathematical and Computer Modelling, 52: 318-333 (2010)
6. Bujtás C, Tuza Z: Smallest set-transversals of k-partitions. Graphs and Combinatorics, 25 (6): 807-816 (2010)
7. Csetverikov D, Axt A: Approximation-free running SVD and its application to motion detection. Pattern Recognition Letters, 31: 891-897 (2010)
8. Csuhaj Varjú E, Dassow J, Vaszil G: Variants of competence-based derivations in CD grammar systems. International Journal of Foundations of Computer Science, 21 (4): 549-569 (2010)
9. Farkas Z, Kacsuk P, Balaton Z, Gombás G: Interoperability of BOINC and EGEE. Future Generation Computer Systems, 26 (8): 1092-1103 (2010)
10. Gerencsér L, Prokaj V: Stability of a class of hybrid linear stochastic systems. IEEE Transactions on Automatic Control, 55 (5): 1233-1238 (2010)
11. Göröcs Z, Sarkadi T, Koppa P, Erdei G: Hologram positioning servo for phase-encoded holographic data storage systems. Applied Optics, 49 (4): 611-618 (2010)
12. Gyárfás A, Sárközy G, Sebő A, Selkow S: Ramsey-type results for Gallai colorings. Journal of Graph Theory, 64 (3): 233-243 (2010)
13. Gyárfás A, Sárközy G, Szemerédi E: Monochromatic Hamiltonian 3-tight Berge cycles in 2-colored 4-uniform hypergraphs. Journal of Graph Theory, 63: 288-299 (2010)
14. György A, Lugosi G, Ottucsák G: On-line sequential bin packing. Journal of Machine Learning Research, 11: 89-109 (2010)
15. Ivanyos G, Karpinski M, Saxena N: Deterministic polynomial time algorithms for matrix completion problems. SIAM Journal on Computing, 39 (8): 3736-3751 (2010)
16. Kádár B, Lengyel A, Monostori L, Suginishi Y, Pfeiffer A, Nonaka Y: Enhanced control of complex production structures by tight coupling of the digital and the physical worlds. CIRP Annals - Manufacturing Technology, 59 (1): 437-440 (2010)

17. Kertész A, Kacsuk P: GMBS: a new middleware service for making grids interoperable. *Future Generation Computer Systems*, 26 (4): 542-553 (2010)
18. Kulcsár B, Bokor J, Shinar J: Unknown input reconstruction for LPV systems. *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, 20 (5): 579-595 (2010)
19. Licsár A, Szirányi T, Czúni L: Trainable blotch detection on high resolution archive films minimizing the human interaction. *Machine Vision and Applications*, 21: 767-777 (2010)
20. Luspay T, Kulcsár B, Varga I, Bokor J: Parameter-dependent modeling of freeway traffic flow. *Transportation Research. Part C*, 18 (4): 471-488 (2010)
21. Mészáros C: On the implementation of interior point methods for dual-core platforms. *Optimization Methods and Software*, 25 (3): 449-457 (2010)
22. Miklós I, Tannier E: Bayesian sampling of genomic rearrangement scenarios via double cut and join. *Bioinformatics*, 26 (24): 3012-3019 (2010)
23. Molnár J, Csetverikov D, Fazekas S: Illumination-robust variational optical flow using cross-correlation. *Computer Vision and Image Understanding*, 114 (10): 1104-1114 (2010)
24. Monostori L, Csáji B, Kádár B, Pfeiffer A, Ilie-Zudor A, Kemény Z, Szathmári M: Towards adaptive and digital manufacturing. *Annual Reviews in Control*, 34 (1): 118-128 (2010)
25. Monostori L, Erdős G, Kádár B, Kis T, Kovács A, Pfeiffer A, Váncza J: Digital enterprise solution for integrated production planning and control. *Computers in Industry*, 61 (2): 112-126 (2010)
26. Németh E, Hangos K, Lakner R: A procedure ontology for advanced diagnosis of process systems. *Journal of Intelligent and Fuzzy Systems*, 21: 19-31 (2010)
27. Szabó Z, Szederkényi G, Gáspár P, Varga I, Hangos K, Bokor J: Identification and dynamic inversion-based control of a pressurizer at the Paks NPP. *Control Engineering Practice*, 18 (5): 554-565 (2010)
28. Szederkényi G: Computing sparse and dense realizations of reaction kinetic systems. *Journal of Mathematical Chemistry*, 47: 551-568 (2010)
29. Sziebig G, Takarics B, Korondi P: Control of an embedded system via internet. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 57 (10): 3324-3333 (2010)
30. Váncza J, Egri P, Karnok D: Planning in concert: a logistics platform for production networks. *International Journal of Computer Integrated Manufacturing*, 23 (4): 297-307 (2010)
31. Vanek B, Balas G, Arndt R: Linear, parameter-varying control of a supercavitating vehicle. *Control Engineering Practice*, 18: 1003-1012 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	283	Ebből kutató ² :	129
PhD, kandidátus:	63	MTA doktora:	19
		Rendes tag és levelező tag:	7
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			4
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			38

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			319
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			319
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	19	idegen nyelven: 9
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 82
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 62
Könyv ⁸	magyarul:	2	idegen nyelven: 1
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 35

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	78,0	Összes független hivatkozás száma:	2160
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	2160		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	3	MTA doktora:	1
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			127
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	105	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	59
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			56
Témavezetések száma: TDK munka:	26	Diplomamunka (BSc):	35
Diplomamunka (MSc):	20	PhD:	69

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		1085,8	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	17	Teljes saját bevétel:	1928,12 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			8
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	40,64	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			9
NKFP:	9	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	59,1 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			3
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	82,18	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			26
EU forrásból:	24	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	580,02 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	20,6 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		552,71	MFt

SZILÁRDTESTFIZIKAI ÉS OPTIKAI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly-Thege M. út 29-33., 1525 Budapest, Pf. 49.

telefon: 1-392 2212; fax: 1-392 2215

e-mail: szfki@szfki.hu; honlap: <http://www.szfki.hu/>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Alaputatások 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. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Erősen korrelált rendszerek

Az olyan frusztrált antiferromágneses rendszerek, ahol az egymással versengő kölcsönhatások megakadályozzák a klasszikus Néel állapot létrejöttét, mind a statisztikus fizikában, mind a kondenzált anyagok fizikájában a komplex viselkedés mintájául szolgálnak. Néhány erősen frusztrált mágnesben a spinek semmilyen hőmérsékleten nem rendeződnek, és a létrejövő spin-folyadék állapotban csupán rövidtávú spin-spin korreláció valósul meg. Ennek tipikus példája a klasszikus antiferromágnesség piroklór rácson, ahol elegendően alacsony hőmérsékleten a spin korrelációk hatványszerű lecsengéssel rendelkeznek, amely egyébként a „Coulomb fázis” jellegzetessége.

A feles spinű $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ mágnesben fellépő ortogonális dimer struktúra a Shastry-Sutherland modell megvalósulását mutatja. Dimér-szorzat variációs hullámfüggvények segítségével, a Dzyaloshinskii-Moriya kölcsönhatást és g-tenzor anizotrópiáját is figyelembe véve, feltérképezték a Shastry-Sutherland modell fázisdiagramját. Ezzel a módszerrel meghatározták a gerjesztési spektrumnak a mágneses tértől való függését. A neutronszórással és ESR-el mért kísérleti spektrumok jellegzetes viselkedését, mint az anizotrópia által indukált zérusterű felhasadást és a nagy tereknél fellépő konstans energiérés fellépését sikerült reprodukálni.

Komplex rendszerek

Amint az jól ismert, a befagyott rendezetlenségnek lényeges szerepe van a fázisátmenetnél és dinamikai folyamatoknál. Ennek a hatását a komplex hálózatok dinamikájára eddig még igen kevésbé vizsgálták. E célból a kontaktfolyamatokat, azaz befagyott rendezetlenséggel rendelkező komplex hálózatokat tanulmányozták a legegyszerűbb modellben. Griffiths fázisokat és egyéb ritka betöltöttségű területekkel kapcsolatos jelenségeket találtak, amelyek az Erdő-Rényi hálózatokon anomálishan lassú (hatványfüggvényszerű, logaritmus, stb.) relaxációk fellépését eredményezték. Hasonló jelenségek meglétét javasolták egyéb, olyan topológiákra, melyek véges perkolációs küszöbvel rendelkeznek. Váratlanul azt találták, hogy a Griffiths fázisok akkor is felléphetnek, ha nincs befagyott rendezetlenség, amely a véges topológiai dimenzióval rendelkező hálózatokban lévő topológiai heterogenitás

következménye. Ezeknek az eredményeknek számos következménye lehet a hálózatokban folyó terjedési jelenségekre és egyéb dinamikai folyamatokra.

Elektronállapotok fémekben

Első elveken alapuló, elektronszerkezet számolásokkal megvizsgálták a periódusos rendszer VB csoportjába tartozó átmeneti fémek (V, Nb és Ta) fázis stabilitását. Már kis mennyiségű szomszédos fémmel való ötvözés képes stabilizálni vagy destabilizálni a tércentrált köbös fázist az alacsonyabb szimmetriájú romboéderes fázishoz képest. Megmutatták, hogy a fázis stabilitását sáv szerkezeti effektusok határozzák meg akkor, ha egy adott VB fém egy, az ugyanabba a d-átmeneti sorozatba tartozó legközelebbi szomszédjával ötvöznek. Ha a szomszéd eggyel kevesebb d elektront tartalmaz, akkor az destabilizálja, ha eggyel többet, akkor stabilizálja a bcc fázist. Ez utóbbi esetben a domináló, elektrosztatikus Madelung energia stabilizálja a fázist. Ezen meglepő jóslatuk érvényteleníti a jelenlegi véleményt az egyszerű d-elektron kötésekről, amely magas szimmetriájú, köbös vagy hexagonális fázisokat követel.

Máig ismeretlen a Föld belső magjának struktúrája és az összetétele. Az elfogadott vélemény szerint a mag fő komponense a vas. Az EMTO módszerrel való vizsgálataik alapján leírták a hexagonális szoros kötésű (hcp) Fe-Mg ötvözetek elasztikus tulajdonságait, 5 és 10 % Mg tartalom esetén a Föld magjában található nyomásig. Bemutatták a Mg ötvözésnek a hexagonális tengely arányokra, a rugalmassági együtthatókra, a sűrűsége és a hangsebességre kifejtett hatását. A Föld magjában lévő feltételek esetén azt jósolták, hogy 5-10 % Mg stabilizálja mind dinamikus, mind termodinamikailag a Fe tércentrált köbös (bcc) fázisát, ennek egy elektronszerkezeti magyarázatot is adva. Bemutatták, hogy az 5-10% Mg-ot tartalmazó bcc Fe-Mg ötvözetre kiszámolt sűrűség, rugalmassági együtthatók és a hangsebesség egyezésben vannak a szeizmikus adatokkal. Emiatt a bcc kristályszerkezetű Fe-Mg ötvözet tűnik a Föld belső magjára a legbiztosabb modellnek.

Nem-egyensúlyi ötvözetek

A mágneses multirétegek tulajdonságait döntő módon meghatározza a határrétegek atomi szerkezete, a két réteget alkotó atomok keveredése. Egyértelmű, hogy számít a mintakészítés során a rétegek elkészítésének sorrendje, egy A-B határréteg tulajdonságai nem azonosak a B-A határrétegével, és két-komponensű multirétegek esetén a két határréteg tulajdonságai összekeverednek, nehezen szétválaszthatók. Ennek vizsgálatára egy harmadik réteget közbeiktató technikát dolgoztak ki: az A-B-C-A-B-C típusú rétegek vizsgálatakor mindig az A-B réteg ugyanazon határfelületét vizsgálják. A módszerrel Fe-B és B-Fe határrétegeket vizsgáltak Fe-B-Ag hármasrétegek esetén.

Gyakorlati alkalmazási lehetősége okán egyre nagyobb nemzetközi érdeklődés irányul a magnetokalorikus effektusra, mely kis energiafogyasztású és környezetbarát hűtőrendszereket tesz lehetővé. Ilyen célból vizsgálták a Mn hatását NANOPERM típusú anyagok magnetokalorikus sajátságaira. Egy további, ugyancsak nagy gyakorlati jelentőségű téma keretében a nukleáris reaktorokban használható új cirkónium alapú ötvözetek magas hőmérsékletű fázisátalakulását tanulmányozták az ELTE Anyagfizikai Tanszékével, az MTA-AEKI-vel és a Paksi Atomerővel együttműködve.

Tevékenységük eredményeképpen a nanoszerkezetek mágneses sajátságainak vizsgálata és ennek kapcsolata egyéb nem-egyensúlyi rendszerekkel megjelent több felsőoktatási intézmény oktatási tematikájában, és így olyan szakemberek képzése válik lehetségessé, akik ismerik ezen gyakorlati szempontból különösen érdekes rendszerek problémáit és

lehetőségeit. Ez előfeltétele annak, hogy a későbbiekben – megfelelő igény és lehetőség esetén – különféle mágneses nanorendszereket a gyakorlatban alkalmazni lehessen.

Különleges szén nanoszerkezetek kutatása

A vizsgálatok a hibrid anyagokra, elsősorban a szén nanocsövekre, illetve ezek más organikus vegyületekkel, pl. fullerénnel alkotott vegyületeire összpontosítottak. E többkomponensű anyagok között megtaláljuk a kémiaiilag funkcionizált, a molekulákkal töltött és a lapos molekulák által fedett nanocsöveket. A nanocsövek felületén kötött vezető polimerekkel alkotott minták tulajdonságait infravörös és Raman spektroszkópiával határozták meg. A szuperkritikus CO₂-vel töltött nanocsövek töltési folyamatának optimalizálása mellett egy spektroszkópiai technika került kifejlesztésre annak meghatározására, hogy a vendégmolekula a csövön belül vagy kívül helyezkedik el. Ezen túl befejezték a fullerénnel töltött nanocsövekben a fullerén molekulák belső csövé való konvertálásának szisztematikus vizsgálatát.

Fázisátalakulások elméleti vizsgálata

A homogén és heterogén kristály-nukleáció leírására egy egyszerű dinamikus sűrűségfunkcionál-elméleten alapuló ún. fázismező kristály (FMK) modellt alkalmaztak. Első lépésben a FMK által 3D rendszerekre jósolt fázis diagram pontosítása történt meg. Ennek keretében meghatározásra került a vonal szabad energia, és a nukleációs gát magassága. A modell segítségével az egyes fázisok stabilitására vonatkozóan is következtetéseket lehetett levonni: a tércentrált és lapcentrált köbös és a hexagonális szerkezetek versenyeznek, míg az egyszerű köbös szerkezet nem stabil. A fázispreferencia a modell paramétereivel szabályozható. A kritikus ponthoz közel a tércentrált köbös, míg távol a lapcentrált köbös stabil, köztük pedig a hexagonális fázis. A kritikus ponttól való távolság függvényében az egyensúlyi kristályalak a gömb alaktól a síklapokkal határolt rombos, dodekaédes csapott dodekaédes és hexagonális prizma alak felé változik.

Rádiófrekvenciás spektroszkópia

Az intézet mag mágneses (NMR) laboratóriumában fehérjék öregedését tanulmányozzák, különös tekintettel a Parkinson-kórra (PD) és a szemlencsében végbemenő folyamatokra. A Parkinson-kór hosszú lefutású neurodegeneratív betegség, mely jellemzően 60 éves kor felett jelentkezik és az agyban a feketeállomány degenerációját okozza. A dopamintermelő idegsejtek elvesztése mozgási rendellenességeket okoz. A PD-t a sejt plazmái idegsejti lerakódások, ún. Lewy-testek (LB) jelenléte jellemzi. Az LB-k fő összetevője az α -szinuklein (aS), mely amiloidszálakba képes rendeződni. Az aS kisméretű, jól oldódó, hőstabil fehérje, mely nagy mennyiségben termelődik az agyban, ám normális agybeli funkciója még nem teljesen megértett. Az aS a rendezetlen fehérjék osztályába tartozik. Ezzel összefüggésben kutatták aS variánsoknál a fehérje-oldószer határfelületi tartományt ¹H, ²³Na és ³⁵Cl NMR-rel. Kifejezett különbségeket találtak az aS variánsok hidratációjának mennyiségében és dinamikai tulajdonságaiban.

Elektrolitikus nanoszerkezetek

Részletes összefoglaló közleményben elemezték az óriás mágneses ellenállást mutató elektrolitikus multirétegek sajátosságait. A rangos nemzetközi anyagtudományi folyóiratban megjelent közleményük a téma teljes korábbi bibliográfiáját tartalmazza.

A Freibergi Műegyetem (Németország) kutatóival folyó együttműködés keretében megvizsgálták, hogy mi a szerepe az áramsűrűségnek Co-Cu/Cu multirétegek előállítása során. A szerkezetvizsgálatok kimutatták, hogy az áramsűrűség csökkenése a mágneses réteg

leválasztása során a réz felhalmozódásához vezet a szemcsehatárokon. Ennek a szemcsehatáron történő szegregációnak a fokozódása a magnetotranszport sajátságok romlásához, illetve granuláris jelleg kialakulásához vezet.

Számos különféle összetételű elektrolit oldatot vizsgáltak meg kobalt és ólom együttes leválasztása érdekében. Mivel a két fém egymással nem elegyedik, mind egyenáramú, mind impulzusos leválasztás alkalmazásakor szegregált fázisok keletkeznek, és multiréteges szerkezet sem hozható létre e két elemből. A fenti tapasztalatokat magnetotranszport vizsgálatok is megerősítették. Megkezdték a Co-Pb granuláris rendszer transzport-sajátságainak vizsgálatát annak megismerése céljából, hogy miként befolyásolja egymást a ferromágneses kobalt és a szupravezetésre képes ólom granuláris elegyben.

Folytatódott az MTA Atomki-val korábban megkezdett együttműködés az elektrokémiai úton leválasztott minták reverz mélységprofil-analízisében. Kidolgozták annak elveit, hogy a mélységprofil-analitikai adatokból hogyan kell a reaktánsok transzportegyütthatójának értékét meghatározni. Az elektrolitikus FeCoNi ötvözetekről kimutatták, hogy a vas beépülése az ötvözetbe tömegtranszport által kontrollált folyamat, és a transzportegyüttható anomálishan nagy értékű.

Fémtechnológia és mágnesség

A tömbi amorf ötvözetekre vonatkozó saját és irodalmi adatok feldolgozása során egy valencia-elektron-számától (e/a) függő összefüggést találtak: a maximális keménység és termikus stabilitás $e/a = 6,5$ körül várható, függetlenül a többségi elem és az amorfképző elemek fajtájától. Az Al-alapú amorf ötvözetek ezt a maximumot csak megközelítik: az e/a függvényében mind a keménység, mind a kristályosodási hőmérséklet monoton növekszik. Ez a felismerés hasznosnak bizonyult új típusú, Al-alapú ötvözetek tervezésében. Például, elősegítették a Ta és Nb amorfképző elemeket tartalmazó $Al_{85}Ta_6Ni_9$ és $Al_{85}Nb_6Ni_9$ összetételű, magas kristályosodási hőmérsékletű, nagy keménységű és egyben nagy szilárdságú új amorf ötvözetek kifejlesztését.

Házilag kivitelezett vizsgálóberendezést állítottak össze az induktív szűrőként használt vasmagok minősítésére üzemi körülmények között. Az elektromágneses interferencia zavar elhárítására alkalmas szűrőket az ipari partner (Tommy Invest Electronics Kft., Szécsény) állította elő.

Tangens hiperbolikus függvénygörbékkel közelítve a mágneses hiszterézis hurkot, modellt dolgoztak ki a kísérleti Steinmetz törvény igazolására, ami szerint a hiszterézis veszteség a relatív csúcs mágnesezettséggel skálázható.

Kifejlesztettek egy olyan DSC mérőfejet, ami 77 és 473 K között működik. Az elérhető maximális felfűtési sebesség 80 K/min.

Komplex folyadékok

Új aszimmetrikus, banán alakú folyadékkristály molekulákat állítottak elő. Kétfajta (celluláris és hengeres) elektrokonvekciós mintázatot találtak pozitív dielektromos és vezetési anizotrópiájú nematikus folyadékkristályban. Banán és rúd alakú nematikus folyadékkristályok elegyeiben a vártnál több dielektromos diszperziót találtak. Az elegyek frekvenciafüggő tulajdonságait a komponensek diszperzióinak szuperpozíciójaként értelmezték. Mintavastagsággal összemérhető méretű elektródák esetében kimérték, illetve numerikusan kiszámolták az elektromos és mágneses térrel keltett direktor deformációkat. A kísérletek a számításokkal jó egyezést mutattak. Negatív diamágneses anizotrópiájú

folyadékkristályban kimutatták a mágneses nanorészecskéknél az elektromos és mágneses téreffektusokra gyakorolt hatását.

Megmérték a réteges szemcsés anyagokon áthaladó nyírási zóna jellemzőit. Megállapították, hogy a zóna a határfelületnél a fénytöréssel analóg módon viselkedik.

Neutronszórás

Neutron pordiffrakcióval meghatározták a szén-tetrabromid rendezett és plasztikus kristályos szilárd fázisára, valamint a folyadékállapot szerkezetére jellemző teljes szórásból származó szerkezeti függvényeket. A parciális radiális eloszlásfüggvények, az orientációs korrelációs függvények és az elemi cellákról készített képek alapján megállapították, hogy a rendezett – rendezetlen átmenet lényege ebben az anyagban (és az analóg tetraédres anyagokban) az él – él típusú orientációk megjelenése. A röntgen- és neutrodiffrakciós adatok együttes Rietveld analízise megmutatta, hogy a tiszta $\text{La}_{0,5}\text{Pb}_{0,5}\text{FeO}_3$ kristályszerkezete lényegesen eltér az igen kismértékben szennyezett ('dópolt') szerkezetektől. Üvegszerű tömbfázist képző tellúr-germánium-gallium, tellúr-germánium-szelén és tellúr-germánium-jód (röviden: TGG, TGS és TGI) szerkezetét határozták meg röntgen- és neutrodiffrakciós, valamint röntgenabszorpciós kísérletekkel. Minden összetétel esetén az összes adatsort modellezték a fordított Monte Carlo (RMC) módszer segítségével. A TGI-ben és a TGS-ben (csakúgy, mint a kétkomponensű $\text{Te}_{85}\text{Ge}_{15}$ -ben) a tellúr atomok átlagos koordinációs száma jó közelítéssel 2-nek adódott, a TGG-ben azonban elérte a $2,4 \pm 0,2$ értéket. Röntgen- és neutrodiffrakcióval meghatározták, majd az RMC módszerrel értelmezték metilén-halogenidek (metilén-klorid, -bromid és -jodid) teljes szórásból származó szerkezeti függvényeit. Megmutatták, hogy a szomszédos molekulák leggyakrabban egyik H-X (X: Cl, Br, I) 'élükkel' fordulnak egymás felé.

Neutronspektroszkópia kondenzált anyagokban

Az epoxi alapú anyagok már eddig is igen széles körben elterjedt alkalmazása indokolja a mikro/nano szerkezetük minél alaposabb megismerését - a további alkalmazási lehetőségek feltárására. Egy sorozat hidrofil epoxi hálózat került előállításra, melyekben blokk kopolimerek, ill. azok különböző hosszúságú végcsoportjainak viselkedését vizsgálták. Az előállított hálózatokat az egyensúly beálltáig deuterált metanolban (CD_3OD), illetve nehézvízben (D_2O) duzzasztották. Míg a metanol a hálózat minden összetevője számára jó oldószer, addig a víz csak a poli-oxi-propilén számára az. Következésképpen a polimer hálózatok CD_3OD , illetve D_2O -ban duzzasztásával előállított gélek kisszögű neutronszórás spektrumai nagymértékben különböznek. A metanolban duzzasztott polimer hálózatokban a kisszögű szórás főként a dinamikus és befagyott inhomogenitásoknak, valamint a hálózatba kapcsolódásnak és a polimer szegmensek mozgásának tulajdonítható. A nehézvízben duzzasztott polimer hálózatokban a fent említett hatásokat felülírja a rendszerben bekövetkező fázisátvitel vízben-gazdag és vízben-szegény nanométernyi doménekre. A domének lokális lamelláris rendeződést mutatnak, amit jól igazol a Teubner-Strey modellfüggvény jó illeszthetősége a kisszögű szórási görbékhez.

Nagy intenzitású és ultragyors fény-anyag kölcsönhatások

Az intézet egyik kutatócsoportjában kihasználták az ultrarövid lézerimpulzusok azon tulajdonságát, hogy mind térben (fókuszálással), mind időben (rövidségük miatt) nagy energiakoncentrációt tesznek lehetővé, ezáltal olyan mértékű hozzájárulást adva az atombeli térerőségekhez, ami alapvetően megváltoztatja pl. az elektronemissziós folyamatok tulajdonságait. Világelsőként megmutatták, hogy extrém rövid idejű hullámcsomagok nemcsak lézerimpulzusként, hanem fémfelületekhez kötött elektromágneses hullámként (ún.

felületi plazmonként) is terjedhetnek, ilyenkor ráadásul lényegesen nagyobb, közel húszszor akkora elektromos térerősség hozható létre annál, mint amit egy lézernyalámban ki tudnánk használni. Az így demonstrált módszer segítségével olyan ultragyors, kizárólag optikai úton történő elektrongyorsítást mutattak ki, mely mindössze néhány száz nanométeres távolságon megy végbe.

Elméleti vizsgálatok keretében a küszöb-fölötti nemlineáris fotoeffektusra és felharmonikus-keltésre kidolgozott nemperturbatív leírásukat finomítva a felületi plazmonok által indukált közeli teret is figyelembe vették. A megfelelően általánosított Volkov-állapotok felhasználásával kísérleti eredményeiket kielégítő pontossággal értelmezték. Az elektronok Wigner-függvényét és az intenzív sugárzási térben kialakuló foton-elektron összefonódás entrópiaváltozását is meghatározták. A Hanbury, Brown és Twiss-típusú korrelációk egy új általános elméletét dolgozták ki, amely a számlálási események Boole-algebráján és klasszikus valószínűség-számításon alapul. A módszer a kevés kvantum korrelációk elemzésére is alkalmas. Vizsgálják attoszekundumos impulzusok keltésének lehetőségét THz-es sugárzás jelenlétében is.

Gázlézerek és gázkisülések

Poros plazma kísérletben egy gyorsított, amorf szerkezetű szilárd fázisú két-dimenziós sokrészecske rendszer kristályosodása során megállapították a kristálycsírák növekedésének időfejlődését és annak mikroszkópikus mechanizmusát. Molekuladinamikai szimulációs módszerekkel meghatározták a térbeli Yukawa rendszerek frekvenciafüggő viszkoelasztikus tulajdonságait (rheológiáját), valamint dipólus és erősen mágnesezett rendszerek hullámdiszperziós tulajdonságait. Klasszikus magyarázatot adtak az ún. roton minimum (közepes hullámhosszoknál megjelenő alacsony frekvenciás hullámmódusok), ill. magas felharmonikusok megjelenésére. Részecskeszimulációs módszerrel tanulmányozták a kettős rádiófrekvenciás gerjesztésű ipari plazmákban az elektródából kiváltott másodlagos elektronok szerepét. Kimutatták, hogy az elektródák anyagi minősége jelentősen befolyásolja a gáztérbeli folyamatokat és a felületekre érkező ionok energia és fluxus független szabályozhatóságát.

Elektrolitkatódos atmoszferikus kisülésben meghatározták a folyadék felszínének porlasztási sebességét az elektronáram függvényében. Azt is kimutatták, hogy alacsony áramok mellett a porlasztás leáll, de a kisülés tovább ég. Ezzel igazolták, hogy a folytonos működéshez elegendő az oldat gőznyomása.

Biomedikában és nanotechnológiában alkalmazott, argon-oxigén gázkeverékben keltett, mikrohullám gerjesztésű kisülésben – numerikus szimulációk segítségével – meghatározták a sterilizálás és felületkezelés szempontjából releváns instabil molekulák keletkezési sebességét, sűrűségét és élettartamát.

Lézeralkalmazások, amorf vékonyrétegek

Az ELI PP projekt egyik nagy eredménye, hogy az ELI infrastrukturális nagyberendezés attoszekundumos része Magyarországra kerül. A Lézeralkalmazási Osztály munkatársai nagyban hozzájárultak a nagyberendezés egyes részegységeinek megtervezéséhez és az ehhez szükséges vékonyréteg technológiai és mérés-technikai módszerek kidolgozásához.

Az AEKI-vel közösen kifejlesztettek egy olyan berendezést, melyben az aeroszol depozíció vizsgálható üregek tudómodellekben.

Megépült egy berendezés a felületi plazmonok által keltett fény statisztikai tulajdonságainak vizsgálatára az autokorrelációs és keresztkorrelációs függvények elemzése alapján.

Kifejlesztésre került egy Nano-LDA foton korrelációs rendszer. Az opto-mechanikus egység és az adatgyűjtő, mérésvezérlő szoftver tesztelése megtörtént. Az első, reális 100 nm részecskéken végzett mérések publikálásra kerültek. Ezekből megállapítható volt, hogy a berendezés hitelt érdemlően határozza meg szimultán módon az egyedi átrepülésekhez tartozó részecske sebességet, méretet és a méret szerinti részecske-koncentrációt. Jelenleg a prototípus alapján a berendezés sorozatgyártmányú fejlesztése és megépítése folyik.

Femtosekundumos lézertechnika

A femtosekundumos lézerek fejlesztésével foglalkozó kutatócsoport tagjai kimutatták, hogy a dielektrikum-rétegekből álló lézertükrök csoportképletetése, illetve szórási és abszorpciós vesztesége arányos a rétegben felépülő állóhullámú tér nagyságával. Ez az összefüggés jelentős mértékben korlátozhatja az erősen diszperzív dielektrikum tükrök alkalmazását nagy csúcsintenzitással rendelkező, femtosekundumos lézer rendszerekben. Az R&D Ultrafast Lasers Kft-vel történő együttműködésben kifejlesztettek egy hangolható, hosszúrezonátoros Ti-zafír lézert, amely kb. ~140 fs hosszúságú, ~10 nJ energiájú lézerimpulzusokat állít elő 19,6 MHz ismétlési frekvencián egy 2,5 W átlagteljesítményű 532 nm-es pumpalézer alkalmazásával, ami ideális fényforrás nemlineáris mikroszkópiai alkalmazásokhoz.

Optikai vékonyrétegek

Kis (0,34 nm) felületi érdességű, 250 x 80 mm méretű tükörhordozókat állítottak elő nanotechnológiai eljárással készített polírozó anyaggal. Kis veszteségű, kis diszperziójú és a 700 – 900 nm hullámhossztartományban nagy visszaverő képességű ($R > 99,8\%$) lézertükröket készítettek sík, ill. nagy görbületi sugarú, nagy átmérőjű (76,2 mm) tükörhordozókon reaktív elektronsugaras vákuumpárolgatással. Széles, közeli infravörös hullámhossztartományban 98%-nál nagyobb visszaverő képességű, kis diszperziójú dielektrikum bevonatos ezüsttükört fejlesztettek ki optikai paraméteres oszcillátorbeli alkalmazásra. Elektronsugaras vákuumpárolgatási technológiát dolgoztak ki új típusú neutron detektorban alkalmazható kemény, oxidmentes bőrrétegek előállítására.

A felsorolt kutatási feladatok megoldásában és hasznosításában minden esetben az Optilab Kft. – egy tipikus mikrovállalkozás – volt az együttműködő partner, az eddigi gyakorlatnak megfelelően.

Optikai egykristályok növesztése és minősítése

Ritkaföldfémekkel adalékolt $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$ (YAB) egykristályokat növesztettek magvezérelt flux módszerrel, hogy tanulmányozzák bennük a lézerhatás lehetőségét. Nagyfelbontású Fourier transzformációs spektroszkópia segítségével meghatározták a Tm^{3+} és Tb^{3+} ionok részletes term diagramját a YAB gazdarácsban. YAB:Tm kristályban Tm-Tm kölcsönhatást és optikai hiperfinom szerkezetet azonosítottak. A Tb^{3+} - színképet kristálytér számításokkal is modellezték. A Tb-átmenetek eltolódását a hőmérséklet függvényében elektron-fonon kölcsönhatással értelmezték. A modellszámítás szerint a rendszerben az egyfononos csatolás a domináns. Meghatározták YAB:Sm kristályok abszorpciós, gerjesztési és emissziós színképeit, az adatokat Judd-Ofelt számításokkal modellezték. Ez a kristály-adalék rendszer alkalmas lehet négyszintes lézer működéshez.

Ortofoszforsavon alapuló felületi marási technikát dolgoztak ki $\text{Lu}_{1,6}\text{Y}_{0,4}\text{SiO}_5:\text{Ce}$ szcintillátor kristályokra. A kristály abszorpciós színképének megváltozása a hőkezelések hatására arra utalt, hogy a növesztés utáni kezelések – mint a kémiai maratás is – befolyásolják a szcintillációs mechanizmust.

Optikai kristályok karakterizációja és hibahelyeinek vizsgálata

Lézer-indukált optikai abszorpciós tranziensek vizsgálatával kimutatták a kis polaronok fűrészfogszerű eloszlását off-centre Czochralski módszerrel növesztett, termokémiailag redukált, periodikusan polarizált $\text{LiNbO}_3\text{:Y}$ egykristályokban. A hasonló szerkezetű LiNbO_3 kristályok kiemelkedő nemlineáris optikai alkalmazások alapját képezik. Impulzusos pumpa-próba elrendezést állítottak össze és optimalizáltak egy atomi átmenet szilárdtest-környezetben inhomogén módon kiszélesedett spektrumvonala homogén vonalszélességének mérésére, melyből a populáció-relaxációs idő is megbecsülhető. A módszert sikerrel alkalmazták a $\text{LiNbO}_3\text{:Er}^{3+}$ és $\text{LiNbO}_3\text{:Yb}^{3+}$ kristályok 980 nm-es átmeneteire. A SIESTA kvantumkémiai program használata lehetővé tette a sztöchiometrikus LiNbO_3 kristályba beépülő protonok lehetséges rácsbéli helyeinek meghatározását.

A $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7\text{:Cu,Ag}$ szövet-ekvivalens termolumineszcens doziméter és neutron detektor anyag tulajdonságainak megértése céljából csak ezüsttel adalékolt $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ egykristályokat állítottak elő, majd a hamburgi HASYLAB/DESY szinkrotron sugárforrását felhasználva jellemezték az Ag^+ centrumok fotolumineszcenciáját.

Sikeresen befejeződött az ionimplantált SiO_2 vékonyrétegekből készített Bragg rácsok tervezésének és készítésének második fázisa. Az ellipszometriai mérések szerint a 20 keV-os N^+ ionokkal implantált vékonyrétegekben 0,05 körüli törésmutató-változást sikerült létrehozni.

Kvantumoptika és kvantuminformatika

Kiterjesztették a Pólya-féle szám definícióját folytonos idejű kvantum bolyongásokra és különböző esetekre meghatározták viselkedését. Megmutatták, hogy a rezonanciától távolra hangolt lézerrel gerjesztett ultrahideg atomok Bose-Einstein kondenzátumának csatolása az optikai rezonátor egy módusához megvalósítja a spin-bozon Dicke modellt és a térbeli önszerveződés analógiát mutat a Dicke-féle szuperradiancia fázisátalakulással.

Megmutatták, hogy egy interferométerben az elektromágneses mező nem csupán a fényzóró objektum helyváltozására, hanem a változás sebességére is érzékeny. Meghatározták a mozgó objektumra ható sebességfüggő sugárzási erőt. Egyszerű geometriai elrendezést találtak, amelyben a mozgó nyalábosztóra ható súrlódási erő sok nagyságrenddel megnövekszik a korábban használt tükör-hűtési elrendezésekhez képest.

Bikromatikus fényimpulzus-pár terjedését írták le rezonáns atomi közegben a Floquet-módszer alkalmazásával. Megmutatták, hogy a terjedés során Raman oldalsávok keletkeznek. Az új módusok stabilak mindaddig, amíg az adiabatikus atomi fejlődés feltétele fennáll.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézetben folyó kutatások nagy része hosszabb, vagy rövidebb távon szolgálja olyan globális társadalmi problémák megoldását, mint a környezetvédelem, az egészségügyi ellátás, az egészség megőrzése, az energia ellátás, stb. A problémák nagyon összetettek, megoldásuk több tudomány és műszaki terület együttműködésétől várható. Az intézet adottságai rövid távon főleg újfajta vizsgálati módszerek és berendezések fejlesztésével, újfajta technológiák kidolgozásával, hosszabb távon különleges anyagok kutatásával járulhatnak hozzá a problémák megoldásához. A fejlesztések egy része spin-off cégek bevonásával, illetve nemzetközi együttműködések keretében folyik. Fontos misszió a tudomány eredményeinek megismertetése, különösen a fiatalokkal.

Egészségügy - A gyógyászati mindennapokban nagyon előnyösek azok az eljárások, melyek vegyszerek felhasználása nélkül alkalmasak különböző gyógyászati eszközök sterilizálására. Az intézet Lézerfizikai Osztályán portugál együttműködés keretében vizsgálták az alacsony-hőmérsékletű plazmák felhasználását sterilizációs célokra. Az eljárás jelenleg a fejlesztés szakaszában van. Ugyanezen az osztályon a lézeres gyógyászati kezelések elterjedése és alkalmazásuk szakszerűségének javítása érdekében 45 orvos továbbképzése történt meg.

A Femtoszekundumos Lézerfizikai Kutatócsoport a Semmelweis Egyetem Dermatológiai Intézetével, az R&D Ultrafast Lasers Kft-vel és a Genetic Immunity Kft-vel együttműködve tanulmányozza ultrarövid lézerimpulzusok biológiai hatását a bőrre nemlineáris mikroszkópiás *in vivo* vizsgálatok során.

Az orvosi implantátumok problémakörével két kutatócsoport foglalkozik. Az egyik csoportnak sikerült kalcium-tartalmú implantátumként felhasználható, nagyszilárdságú biokerámiát kifejleszteni. A kutatás során vizsgálták az összetétel és a technológiai paraméterek szerepét a szerkezet és a mechanikai tulajdonságok kialakulására. A másik kutatócsoport olyan védőbevonatok kifejlesztésén dolgozik, melyek eredményesen használhatók fém-implantátumok biokompatibilitásának javítására. Sugárzásos polimerizációval sikerült orvosi acél felületére pórusos polimer gyógyszerkibocsátó bevonatot előállítani. A réteg tapadását és a felület teljes borítottságát gyémántszerű amorf szén átmeneti réteg biztosítja. A kiinduló keverék összetételének módosítása révén a pórusos tulajdonságok - és így a gyógyszerkibocsátás kinetikája is - széles tartományban változtathatók.

A Fémkutatási Osztály egyik laboratóriuma a magmágneses rezonanciával (NMR) kapcsolatos fizikai alapjelenségek megismerésével foglalkozik. Kutatásaik és eredményeik hozzájárulhatnak olyan betegségek kórokinak megértéséhez és gyógymódjuk kifejlesztéséhez, melyek jelentősége a társadalom elöregedésével párhuzamosan fokozódik. A szélesebb közvélemény tájékoztatása érdekében a *szemlencsék elhomályosodásával* kapcsolatos jelenlegi tudományos ismereteket – az együttműködő szemorvos kutatóval közösen – a nem szakmabeliek számára is érthető módon megfogalmazott közleményben foglalták össze a Természet Világa folyóiratban.

Környezetvédelem - Napjaink nagy kihívása a levegő *szennyezettségének* csökkentése. Az intézet Lézeralkalmazási Osztálya több levegőszennyezettség mérő optikai lézeres részecskeszámláló berendezést fejlesztett ki, melyek a levegőben lebegő szilárd és cseppfolyós részecskék (aeroszolk) koncentrációját, méreteloszlását és optikai paramétereit mérik. Ezek a műszerek, melyekből több változat is készült a különböző koncentráció és mérettartományokra, az egészségvédelemben, a gyógyszeriparban, az orvostudományban, a vegyiparban és számos egyéb területen is hasznosultak.

Nagyrészt ezekre a berendezésekre alapozva hoztak létre egy mobil (mikrobuszba épített) környezetvédelmi laboratóriumot a légkör állapotának vizsgálatára. A mobil laboratórium nagyon hasznosnak bizonyult a vörösiszap katasztrófa következményeinek vizsgálatára, a legszennyezettebb területek azonosítására. A vizsgálatok egy részét a Pannon Egyetem és egy veszprémi akadémiai kutatócsoport munkatársaival közösen végezték. Javaslatot tettek a toxikus hatás csökkentésére. Az első eredményeket nemzetközi szakfolyóiratban publikálták.

A mobil laboratóriummal vizsgálták a levegő állapotát Budapesten és néhány ipari vállalat, valamint a repülőtér környékén. A vizsgálatok alapján levegő-szennyezettség térképeket állítottak össze. Az elvégzett mérési kampányok során olyan közérdekű eredményeket kaptak és tettek közzé, melyek több százezer embert érintenek és hozzájárulnak a társadalom egészségi állapotának és életminőségének javításához.

Másik nagy problémakör a *szennyvizek* kezelése. A szennyvizek kémiai és fizikai szempontból nagyon bonyolult rendszerek, kezelésükhöz elengedhetetlen az összetétel állandó monitorszerű mérése. Erre a célra a jól ismert laboratóriumi mérőkészülékek nem használhatóak, mert ezekbe a nyers, kezeletlen szennyvíz közvetlenül nem vezethető be. Helyszíni, felügyelet nélküli, folytonos mérések elvégzésére nem alkalmasak. Ezt a problémát oldja meg a Lézerfizikai Osztály és egy spin-off cég által kifejlesztett ELCAD nevű berendezés, mely elektrolitkatódos, atmoszférikus nyomású ködfénykisülés vizsgálatán alapul (Electrolyte Cathode Atmospheric Glow Discharge, ELCAD). A kisülés által kibocsátott színek tartalmazza a szennyvízben feloldott nehézfémek atomi vonalait. Ezek intenzitását mérve a nehézfémek koncentrációja meghatározható. Az intézetben végzik az eljárást megalapozó alapkutatásokat.

A kulturális örökség megőrzése - A kulturális örökség megőrzésének egyik feladata az ásatások során előkerült vagy talált tárgyak gondos tanulmányozása, esetenként a későbbi hamisítások kiszűrése, mivel ily módon értékes információkhoz lehet jutni e tárgyak készítésének technológiájára és az emberek életmódjára vonatkozóan. A vizsgálatok azért különlegesek, mivel csak roncsolásmentes eljárások jöhetnek számításba, esetenként csak nagyon kis mennyiségű minta áll rendelkezésre, és a minta kezelése különös gondot igényel. A neutronfizikai módszerek egy része alkalmas e követelmények kielégítésére. Az intézet Neutron-spektroszkópiai Osztálya bekapcsolódott a CHARISMA nevű EU-s programba, mely antik tárgyak neutronfizikai módszerekkel történő vizsgálatát, a kutatások összehangolását tűzte ki célul. 2010-ben különböző antik vas tárgyak (szénacélok) nagyfelbontású vizsgálata (a széntartalom meghatározása, a fázisazonosítás, a textura és a diszlokáció sűrűség vizsgálata) történt meg. A Budapesti Kutatóreaktornál dolgozó kutatócsoportok a 2010. évi Világörökség Nap alkalmával több száz érdeklődőnek mutatták be kutatásaik eredményeit.

Új anyagok fejlesztése - Az intézetben több olyan kutatás folyik, melyek eredményeinek felhasználása csak hosszabb távon várható. A Kísérleti Szilárdtestfizikai Osztályon különleges szén alapú anyagokat szintetizálnak és vizsgálnak, melyek felhasználhatók lesznek a félvezető iparban, biotechnológiában, és így hozzájárulhatnak környezetvédelmi és információ-technológiai problémák megoldásához. A fázisátmenetek és a kristályosodás vizsgálatában elért eredmények lehetővé teszik olyan új, a felhasználás szempontjából jobb tulajdonságokkal rendelkező ötvözetek előállítását, melyek az energiaipar és más anyag-intenzív területek fejlődését is elősegíthetik. Az egyedi biomolekulák atomi szerkezetének meghatározásában folytatott kutatások pedig az élő szervezetek jobb megismerésén keresztül nagyobb hatású gyógyszerek, pontosabb diagnosztikai eljárások kidolgozását segítik elő, ezzel javítva az egészségügyi ellátást, ezen keresztül az életminőséget.

Az újabb, a jelenlegieknél hatékonyabban működő lézerek fejlesztéséhez újabb anyagokra, különleges optikai tulajdonságokkal rendelkező egykristályokra van szükség. A Kristályfizikai Osztály kristálynövesztő laboratóriumában folyó kísérletek az ultraibolya tartományban működő nemlineáris optikai kristályok növesztését célozzák, ezekre az orvosi és műszaki alkalmazásokban jelentős igény van. Újfajta szcintillátorok, kristálydetektorok kifejlesztése, határfokuk javítása az orvosi diagnosztikai és biztonságtechnikai alkalmazások szempontjából fontos.

A kutatási eredmények megismertetése - Fontos feladatuknak tekintik a tudományos eredmények minél szélesebb körű megismertetését és a természettudományok iránti érdeklődés felkeltését az ifjúság körében. Az előbbi cél elérése érdekét szolgálják azok a népszerűsítő cikkek, melyeket különböző folyóiratokban publikáltak. Fiatal kutatók szervezik meg évente a Magyar Tudomány Napjához kapcsolódó nyílt napokat. Ezekon középiskolás látogatókat fogadnak. 2010-ben 3 gimnáziumi osztály mintegy 70 diákja ismerkedett meg az intézetben folyó kutatásokkal.

A kutatók az ultragyors optikával és fizikával kapcsolatos eredményeiket rendszeresen bemutatják különböző ismeretterjesztő formákban. Kutatásaikról 2010-ben a Delta tudományos ismeretterjesztő műsor is beszámolt.

Az intézetben dolgozó egyik fiatal kutatónő elnyerte az L'Oréal – UNESCO „Women for Science” díjat, és a média érdeklődésébe került. Számos interjúban ismertette sikeres életútját, példát mutatva ezzel a természettudományok iránt érdeklődő fiatal lányoknak.

A Kristályfizikai Osztály által Pécsen rendezett EURODIM 2010 „Hibák szigetelőanyagokban” tudományos konferencia gazdagította Európa Kulturális Fővárosának programját, felkeltve az odalátogatók és a közvélemény érdeklődését a fizikai tudományok iránt. Az SZFKI részt vett ugyancsak Pécsen az idei Fizikus Vándorgyűlés nyílt napjának megszervezésében, melyen az intézet három vezető kutatója tartott ismeretterjesztő előadást a nagyközönség számára. Az egyik fiatal kutató interjút adott az Élet és Tudomány részére.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet kutatásai során széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésre támaszkodik. Történelmi előzmények, tematikai hasonlóságok és a közös infrastruktúra használata folytán legszorosabb kapcsolatai a telephelyen működő akadémiai intézetekkel vannak. A telephely közös feladatai közül az intézet működteti a közös műszaki könyvtárat. Szoros együttműködés alakult ki a KFKI Atomenergia Kutatóintézettel (AEKI) a Budapesti Neutron Központ keretében, a kísérleti atomreaktor hasznosítása céljából. Az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet munkatársaival több hazai és nemzetközi projekt megvalósítása folyik. Az együttműködés eredményességét egy közösen benyújtott nemzetközi szabadalom elfogadása mutatja.

Az elmúlt évek erőfeszítéseinek eredményeképpen az EU egyik nagy infrastrukturális beruházása, az attoszekundumos lézer berendezés Szegeden épül meg. 2010-ben lezárult az ELI előkészítő szakasza, melyet magyar részről az intézet koordinált. A nem szokásos feladatok sikeres megvalósítása érdekében szoros együttműködés alakult ki a projekt hazai résztvevőivel, elsősorban az NKTH-val, a Szegedi Egyetemen, a Pécsi Egyetemen és az MTA Rézecske- és Magfizikai Kutatóintézettel (RMKI). A projekt keretében az intézet több workshop-ot szervezett és képviselte Magyarországot a program nemzetközi tanácskozásain.

Felsőoktatás

A hazai kapcsolatok fontos részét képezi a felsőoktatásban való részvétel. Az intézet munkatársai több egyetemen vesznek részt a graduális és posztgraduális képzésben a szilárdtestfizika és az optika tárgykörében. Különösen szoros a kapcsolat az ELTE TTK-n folyó fizikus- és a BME TTK-n folyó mérnök-fizikusképzéssel, továbbá a PTE Fizikai Intézetében folyó oktatással. Az intézet egyik kutatóprofesszora a Pécsi Egyetem fizikai doktori iskolájának vezetője. Munkatársaival együtt jelentős szerepet vállal az elméleti fizika és az informatika pécsi oktatásában. 2010-ben az intézet 38 kutatója vett részt az egyetemi oktatásban, rendes és speciális előadások tartása, továbbá szemináriumok és laborgyakorlatok vezetése formájában. Az intézetben 14 hallgató dolgozott BSc, és 22 MSc szintű diplomamunkán, 39 pedig PhD disszertációja összeállításán. Kilenc fiatal kutató szerzett PhD fokozatot. Egy kutató lett az MTA doktora. Az intézet munkatársai 3 egyetemi tankönyvvel, továbbá 1 tankönyv fejezet megírásával támogatták a felsőoktatást.

Nemzetközi kapcsolatok

A nemzetközi kapcsolatok alapját főleg az EU 7. keretprogramjához tartozó és egyéb nemzetközi projektek, kétoldalú akadémiai és TÉT egyezmények és informális kapcsolatok képezik. Az intézet jelenleg 10 EU-s projekt megvalósításán dolgozik, közülük a legjelentősebb a már említett Extreme Light Infrastructure (ELI). Előkészítő szakaszában, melyet magyar részről az intézet koordinált, 13 ország vett részt.

Intenzív nemzetközi együttműködésben folynak a neutronspektroszkópiai kutatások is. A Budapesti Neutron Központban (BNK), melynek kutatóreaktora egyedüli nagyberendezés a régióban, több ország kutatói végeztek méréseket az EU támogatásával. A BNK rendszeresen tart elméleti és gyakorlati képzéseket. Az idén megrendezett *5th Central European Training School on Neutron Scattering (CETS 2010)* a régió fiatal kutatói számára nyújtott unikális lehetőségeket. Az előadók között ott voltak a nagy európai nukleáris központok kiváló kutatói. Egy másik kurzuson az Institute for Nuclear Physics and Chemistry (Mianyang, Kína) munkatársai ismerkedtek meg a BNK-ban folyó neutronfizikai kutatásokkal, valamint az egyik spin-off cég (Mirrotron Co.) által kifejlesztett neutronfizikai berendezésekkel. Az EU spallációs programjának keretében japán, olasz és hazai intézmények bevonásával workshopon elemezték a spallációs neutronforrások target problémáit.

Az intézet kutatói számos mobilitás típusú tematikus nemzetközi együttműködésben vesznek részt. Az MTA egyezményeken alapuló kétoldalú tematikus együttműködések elsősorban az akadémiai intézetekkel való kapcsolattartást teszik lehetővé. Kétoldalú akadémiai megállapodások alapján 10 ország kutatóival 22 témában folytak közös tematikus kutatások, a témák fele 2010-ben kezdődött.

A kormányközi tudományos és technológiai megállapodások (TÉT) főleg a külföldi egyetemekkel folytatott közös kutatásokat segítették elő, de hasznosnak bizonyultak a PhD képzésben megvalósuló együttműködések szempontjából is. Az intézet 2010-ben 6 ország 6 kutatócsoportjával folytatott közös kutatásokat TÉT együttműködések keretében.

A fenti együttműködések egészíti ki egy MTA-NSF és két nemzetközi együttműködésben megvalósuló OTKA projekt, továbbá több bilaterális egyezmény alapján folytatott kutatás is. Közülük kiemelt érdemel svéd kutatókkal a fémek elektronszerkezetére vonatkozó kutatás, mely 2010-ben 21 közös publikációt eredményezett. Úgyszintén nagy jelentőségű a német Max-Planck-Institut für Quantenoptik (München-Garching) intézettel folytatott együttműködés, nemcsak az ultragyors fény-anyag kölcsönhatások kísérleti és elméleti vizsgálatában, hanem az ELI program megvalósításának előkészítésében is. A Service de Physique de l'État Condensé (CEA-Saclay, Franciaország) egyik vezető munkatársa évek óta irányítja az intézetben folyó alacsony hőmérsékletű kutatásokat.

A fentiekén kívül az intézetnek a kutatás minden területén informális kapcsolatai vannak európai és tengerentúli egyetemekkel és kutatóintézetekkel. A 2010-ben megjelent idegen nyelvű publikációk nagy részében legalább az egyik társszerző külföldi. Az intézet munkatársai nemzetközi rendezvényeken 129 tudományos előadást tartottak és 98 posztert mutattak be.

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 külföldi munkavállalások és ösztöndíjak különösen a fiatal kutatók szakmai fejlődése, nemzetközi kapcsolataik építése szempontjából fontosak. A kutatók külföldi munkavállalásában hosszabb idejű tartózkodások váltak tipikussá, az előző években

előforduló néhány hónapos tartózkodásokkal szemben. 2010-ben 17 kutató töltötte az egész évet külföldön.

Az intézetben 15 külföldi vendégkutató dolgozott összesen 45 emberhónapot. Öt amerikai és egy francia egyetemi hallgató itt végezte nyári gyakorlatát. Rajtuk kívül 3 doktorandusz, illetve postdoc hallgató töltött összesen 30 emberhónapot az intézetben.

Az intézet nemzetközi konferenciát szervezett a szigetelőanyagokban levő hibahelyek problémakörében (*11th Europhysical Conference on Defects in Insulating Materials*, EURODIM 2010, Pécs, 12-16 July, 2010), melyen több mint 200 kutató vett részt Európából, Ázsiából, Afrikából és Amerikából. Az intézet munkatársai részt vállaltak egy további nemzetközi konferencia (*XXXI. European Conference on Laser Interaction with Matter*, Budapest, 6-10 September 2010., 140 résztvevő) továbbá az idei Fizikus Vándorgyűlés (Pécs, 2010. aug. 24-27.) megszervezésében is.

Az intézet munkatársai nemzetközi találkozót szerveztek Fazekas Patrik, az intézet nemrég elhunyt nemzetközileg elismert kiváló munkatársának emlékére (*Resonating Valence Bond Physics: Spin Liquids and Beyond*, Budapest, October 13-15, 2010). A tanácskozáson 35 kutató vett részt Európából, Japánból, Kanadából és Indiából.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az eredményes hazai pályázatok közül legjelentősebb a LENDÜLET program egyik projektje, mely a három évre kapott 135 MFt-os támogatással egy új elméleti spektroszkópiai kutatócsoport létrehozását és működését tette lehetővé. A projekt célkitűzései között szerepel félvezető nanoszerkezetű anyagok tervezése és alkalmazási lehetőségeik vizsgálata (*Design and characterization of semiconductor nanostructures for biomarker, solar cell and magnetometer application*). Megkezdődött a kutatócsoport összeállítása és a szilíciumkarbid nanorészecskék előállításának megvalósítása céljából. A napelemes alkalmazások szempontjából nagy jelentőségű az USA-beli UC Davis egyetemmel a National Science Foundation által támogatott együttműködés (*SOLAR Collaborative: Multiple exciton generation and charge extraction in all-inorganic nanostructured solar cells*). Az MVM Zrt. évi 5 MFt értékben támogatja a napelemkutatást három éven át.

Jelentős támogatást kapott az intézet egyik fiatal munkatársa, aki 2009-ben eredményesen vett részt az Európai Kutatási Tanács (ERC) által meghirdetett fiatal kutatói (Starting Grant) pályázatban. Bejutott a második pályázati körbe, de ott támogatást nem nyert. Az NKTH értékelte a kiemelkedő kutatási ötletet és annak hazai megvalósításához négy évre 122 MFt összegű támogatást ítél meg (NKTH-ERC_HU-09 OPTOMECH; *Optomechanikai csatolás: a rezonátoros kvantumelektrodinamika kiterjesztése*). A kutatás célja mikroszkopikus méretű, erősen csatolt optomechanikai rendszerek elméleti leírásának megalapozása, konkrét rendszerek megvalósítására tett javaslatok kidolgozása, és alkalmazási lehetőségeik feltárása. Az új kutatócsoport a témavezető fiatal postdoc munkatársaiból alakult meg.

Az eredményes hazai pályázatok közül érdemes megemlítenünk a Nemzeti Technológia Program keretében elnyert, „Új szállézeres technológián alapuló szálintegrált nemlineáris mikroendoszkóp fejlesztése farmakológiai és diagnosztikai vizsgálatokra” témájú pályázatot, mely három évre összesen 220 MFt értékű támogatást nyert. 2010-ben a támogatás felhasználásával két új laboratóriumot, egy nemlineáris mikroszkópia és egy femtoszekundumos szállézer laboratóriumot sikerült kialakítaniuk.

A közös projektek munkáit jelentősen hátráltatta a támogatások befagyasztása 2010-ben.

Az alapkutatások finanszírozása szempontjából kulcs fontosságú OTKA pályázatok elnyerése a korábbi évekhez hasonlóan történt. Az elmúlt négy évben az új OTKA projektek száma és támogatása a következőképpen alakult: 2007-ben 11 új projekt 132 MFt, 2008-ban 6 új projekt 93 MFt, 2009-ben 6 új OTKA projekt 122 MFt, 2010-ben 5 új projekt 123 MFt értékben. Az új projektek közül kettő konzorciális formában, NKTH-OTKA közös finanszírozással valósul meg (*Önszerveződő lamelláris molekuláris szerkezetek struktúrája és dinamikai sajátosságai*, az intézetre jutó támogatás 51 MFt, továbbá a Szcintillátor anyagok orvosi képalkotás céljára, projekt 26 MFt támogatással). Ezek a projektek újfajta anyagok kifejlesztését szolgálják. Három OTKA projekt támogatása kisebb (*Elektro és fotomechanikai jelenségek szerves lágy anyagokban*, 21,6 MFt, *Ultragyors diffrakciós egyrézecske leképzés*, 16,4 MFt, *Mikroszerkezet és mágneses ellenállás kapcsolata nanométeres skálájú multirétegekben*, 8 MFt).

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Murg V, Legeza Ö, Noack RM, Verstraete F: Simulating strongly correlated quantum systems with tree tensor networks. *Phys. Rev. B*, 82: 205105/1-11 (2010)
2. Sólyom J: Fundamentals of the physics of solids, Vol. 3 Normal, broken-symmetry, and correlated systems. Springer, Berlin Heidelberg New York (2010)
3. Iglói F, Peschel I: On reduced density matrices for disjoint subsystems. *EPL*, 9: 40001/1-6 (2010)
4. Kovács IA, Iglói F: Renormalization group study of the two-dimensional random transverse-field Ising model. *Phys. Rev. B*, 82: 054437/1-13 (2010)
5. Vörös M, Deák P, Frauenheim Th, Gali Á: The absorption of oxygenated silicon carbide nanoparticles. *J. Chem Phys.*, 133: 064705/1-6 (2010)
6. Simon E, Szilva A, Újfalussy B, Lazarovits B, Zaránd G, Szunyogh L: Anisotropic Rashba splitting of surface states from the admixture of bulk states: Relativistic ab initio calculations and $k \cdot p$ perturbation theory. *Phys. Rev. B*, 81: 23543/1-5 (2010)
7. Bousige C, Rols S, Cambedouzou J, Verberck B, Pekker S, Kováts É, Durkó G, Jalsovszky I, Pellegrini É, Launois P: Lattice dynamics of a rotor-stator molecular crystal: Fullerene-cubane C₆₀-CH. *Phys. Rev. B*, 82: 195413/1-10 (2010)
8. Ben-Valid S, Botka B, Kamarás K, Reiss L, Zeng A, Yitzchaik S: Spectroscopic and electrochemical study of hybrid materials of conducting polymers and carbon nanotubes. *Carbon*, 4: 2773-271 (2010)
9. Kumar P, Heuer J, Tóth-Katona T, Éber N, Buka Á: Convection-roll instability in spite of a large stabilizing torque. *Phys. Rev. E*, 81: 020702(R)/1-4 (2010)
10. Salamon P, Éber N, Buka Á, Gleeson JT, Sprunt S, Jákli A: Dielectric properties of mixtures of a bent-core and a calamitic liquid crystal. *Phys Rev E* 81: 031711/1-11 (2010)
11. Tompa K, Bánki P, Bokor M, Kamasa P, Rácz P, Tompa P: Hydration water/interfacial water in crystalline lens. *Exp Eye Res*, 91: 76-4 (2010)
12. Bakonyi I, Péter L: Electrodeposited multilayer films with giant magnetoresistance (GMR): progress and problems. *Progr Mater Sci.*, 55: 107-245 (2010)
13. Srivastava SK, Srivastava VK, Joshi A, Kamasa P, Varga LK, Khovaylo VV, Chatterjee R: A low temperature anomaly observed in off-stoichiometric Ni-Mn-Ga system studied

- by higher harmonic ac-susceptibility measurements. *App. Phys. Lett.*, 97: 122505/1-3 (2010)
14. Avdeev MV, Tropin TV, Bodnarchuk IA, Yaradaikin SP, Rosta L, Aksenov VL, Bulavin LA: On structural features of fullerene C₆₀ dissolved in carbon disulfide: Complementary study by small-angle neutron scattering and molecular dynamic simulations. *J. Chem Phys.*, 132: 164515 (2010)
 15. Meiszterics A, Rosta L, Peterlik H, Rohonczy J, Kubuki S, Hentis P, Sinkó K: Structural characterization of gel-derived calcium silicate systems. *J. Phys Chem A*, 114: 10403-10411 (2010)
 16. Markó M, Krexner G, Schefer J, Szakál A, Cser L: Atomic resolution holography using advanced reconstruction techniques for 2D detectors. *New Journal of Physics*, 12: 063036 (2010)
 17. Jóvári P, Kaban I, Kohara S, Takata M: Comment on 'Formation of large voids in the amorphous phase-change memory Ge₂Sb₂Te₅ alloy'. *Phys. Rev. Lett.*, 104: 019601/1-1 (2010)
 18. Temleitner L, Pusztai L: Local order and orientational correlations in liquid and crystalline phases of carbon tetrabromide from neutron powder diffraction measurements. *Phys. Rev. B*, 81: 134101/1 (2010)
 19. Dombi P, Irvine SE, Rácz P, Lenner M, Kroó N, Farkas G, Mitrofanov A, Baltuska A, Fuji T, Krausz F, Elezabi AZ: Observation of few-cycle, strong-field phenomena in surface plasmon fields. *Opt Express*, 23: 24206-24212 (2010)
 20. Donkó Z, Schulze J, Hartmann P, Korolov I, Czarnetzki U, Schüngel E: The effect of secondary electrons on the separate control of ion energy and flux in dual-frequency capacitively coupled radio frequency discharges. *Appl. Phys. Lett.*, 97: 01501/1-3 (2010)
 21. Hartmann P, Douglass A, Reyes JC, Matthews LS, Hyde TW, Kovács A, Donkó Z: Crystallization dynamics of a single layer complex plasma. *Phys. Rev. Lett.*, 105: 115004/1-4 (2010)
 22. Beke S, Sugioka K, Midorikawa K, Péter Á, Nánai L, Bonse J: Characterization of the ablation of TeO₂ crystals in air with femtosecond laser pulses. *J. Phys D: Appl. Phys.*, 43: No. 025401 (2010)
 23. Schoke B, Imlau M, Brüning H, Merschjann C, Corradi G, Polgár K, Naumova II: Transient light-induced absorption in periodically poled lithium niobate: Small polaron hopping in the presence of a spatially modulated defect concentration. *Phys. Rev. B*, 81: 132301/1-4 (2010)
 24. Lengyel K, Kovács L, Péter Á, Polgár K, Corradi G, Baraldi A, Capelletti R: Thermal kinetics of OH⁻ ions in LiNbO₃:Mg crystals above the photorefractive threshold. *Appl. Phys. Lett.*, 96: 191907 (2010)
 25. Kollár B, Stefanák M, Kiss T, Jex I: Recurrences in three-state quantum walks on a plane. *Phys. Rev. A*, 82: 012303/1-7 (2010)
 26. Nagy D, Konya G, Szirmai G, Domokos P: Dicke-model phase transition in the quantum motion of a Bose-Einstein condensate in an optical cavity. *Phys. Rev. Lett.*, 104: 130401/1-4 (2010)
 27. Xuereb A, Freearde T, Horak P, Domokos P: Optomechanical cooling with generalized interferometers. *Phys. Rev. Lett.*, 105: 013602/1-4 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	164	Ebből kutató ² :	111
PhD, kandidátus:	55	MTA doktora:	25
		Rendes tag és levelező tag:	7
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			35

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			271
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			263
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	2	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 198
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 198
Könyv ⁸	magyarul:	2	idegen nyelven: 1
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	1	idegen nyelven: 7

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	485,0	Összes független hivatkozás száma:	4766
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	5319		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	9	MTA doktora:	1
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			129
		posztterek száma:	98
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	46	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	13
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			38
Témavezetések száma: TDK munka:	6	Diplomamunka (BSc):	14
Diplomamunka (MSc):	22	PhD:	39

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		788,18	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	17	Teljes saját bevétel:	470,37 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			24
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	73,09	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			6
NKFP:	4	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	123,55 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	67,12	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			11
EU forrásból:	10	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	164,84 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	18,54 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			93,02 MFt

MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI TÁMOGATOTT
KUTATÓCSOPORTOK

BME ALKALOIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Huszthy Péter, az MTA doktora
1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.
telefon: 1-463 1071; fax: 1-463 3297
e-mail: huszthy@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Tovább folytatják gyógyszeripari együttműködésben a különböző indol-származékok és biológiailag jelentős természetes anyagok és azok származékai előállítását. Vizsgálják az új, daganatellenes hatású vegyületek szintézisét, melynek során a vinblasztin egyik monomer alkaloidjának, a vindolinnak szén-szén kettős kötésén telített új, várhatóan citosztatikus aktivitású származékait tervezik előállítani. Előállítják a galanthamin további eddig le nem írt acetilkolinészteráz gátló hatású származékait. Kísérleteket végeznek az általuk kidolgozott szintézismódszerrel az *Amaryllidaceae* alkaloidokra jellemző tetraciklus átalakításaira. *Források: OTKA: 1 MFt, Richter Gedeon Nyrt. megbízás: 13 MFt*

A korábbiakban sikeresen alkalmazott konvergens és biomimetikus aszpidoszpermán- és *pszeudo*-aszpidoszpermánváz felépítési stratégiával racém alkaloidok nyerhetők. További célként jelölték meg a természetben előforduló, optikailag aktív alkaloidok szintézisének a megvalósítását. A tervezett munkának egyik racionális lehetősége a királis szintézisstratégia alkalmazása. Az ismert utak közül a választás a királis segédpartner beépítésével történő megvalósításra esett. Királis segédpartnerként a könnyen hozzáférhető D-glükózból több lépésben kialakított molekulát választották, melyet a szubsztrátként alkalmazott triptamin származékba építettek be. A monoszacharid egységet tartalmazó új szubsztrátot ezt követően alkalmasan kiépített aldehidekkel kívánunk reakcióba vinni. *Forrás: Richter Gedeon Nyrt. megbízás: 13 MFt*

Új átrendeződési reakciók vizsgálata. Új típusú, UV szűrőkben alkalmazható szerves vegyületek szintézisének kidolgozása. *Források: Bayer CropScience (Németo.): 25,000 €, Bábolna Környezetbiol. Közp.: 0,75 MFt*

Folytatni kívánják biokatalizátorok fejlesztését és alkalmazását szerves szintézisekben felhasználható sztereoszelektív folyamatokban, főként fontos királis intermedierek tiszta enantiomerként történő előállítására. A szakaszos reakciók mellett fejlesztik a környezetbarát biotranszformációkat folyamatos reaktor-rendszerekben is. A modern reaktortechnikák segítségével integrált kemoenzimatikus eljárásokat valósítanak meg. Megfelelő molekuláris genetikai és mikrobiológiai háttér felhasználásával új biokatalizátorokat is fejlesztenek (pl. rekombináns enzimek expressziója és módosítása) és alkalmaznak. Tovább kívánják vizsgálni a kémiai reakciókat és az enzimműködés/szelektivitás mechanizmusait fejlett számítási módszerek segítségével. *Forrás: NKFP pályázat: 25 MFt*

Folytatják a heterociklus (piridin, akridin és akridinon) egységeket tartalmazó koronaéter alapú új szelektív szenzormolekulák és hatékony szelektormolekulák előállítását. Ezek a makrociklusok az élettani szempontból fontos szerves ionok analitikájában és elválasztásában nyerhetnek széleskörű alkalmazást. Ugyancsak folytatják a várhatóan fontos biológiai aktivitással rendelkező új 5,7-diazaindol-2-on származékok szintézisét. *Források: OTKA: 8,9 MFt, EGIS: 2,3 MFt*

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport által kidolgozott és a Richter Gedeon Nyrt. által ipari méretekre nagyított szintézissel gyártott és forgalmazott két készítmény forgalmi értéke a Cavinton esetében

2009-ben elérte az évi 18 milliárd Ft-ot, az ugyancsak általuk kidolgozott eljárással gyártott Fluconazol forgalma pedig 2008-ban a 4,5 milliárd Ft-ot. Mindkét eljárás számos szabadalommal védett, amelyekben a kutatócsoport tagjai nevesítve találhatók. A prosztanoid értékesítés a Chinoïn-Sanofi gyár részéről elérte a kb. 6 milliárd Ft-ot, gyártása mintegy 120 főt köt le. A rákellenes terápiában alkalmazott vinblasztin vindolin komponensének 14,15-helyzetű szén-szén kettős kötésének katalitikus hidrogénezésével előállították a megfelelő dihidrovindolint, melyet a 16-os észtercsoporton keresztül L-, ill. D-triptofán-metilészterrel összekapcsolva jelentős daganatellenes hatású molekulákhoz jutottak. Az *Amaryllidaceae* alkaloidok közé tartozó és az Alzheimer-kór kezelésében alkalmazott galanthamin kutatása során a kutatócsoportban megtervezett szintézis segítségével előállították a demetoxilycoraminont. Szintetizáltak egy olyan új galanthamin-származékot, melynek acetilkolinészteráz-gátló hatása egy nagyságrenddel meghaladta a galanthaminét. *Források: OTKA: 1 MFt, Richter Gedeon Nyrt.: 13 MFt*

Az aril(hetaril) geranil éterek termikus átrendeződésének vizsgálatában több új átrendeződési reakciót tártak fel, amelyek alkalmasak új benzo[a]kromen, benzo[a]xanthen, furo[3,2-f]jizokinolin és furo[3,2-h]kinolin előállítására. *Források: Bayer CropScience (Németo.): 25,000 €, Bábolna Környezetbiol. Közp.: 0,75 MFt*

Új biokatalizátorok előállítását valósították meg fonalagombák labor és kisüzemi léptékben végzett fermentációjával. Vizsgálták a saját és kereskedelmi lipázok, valamint az ammónia liázok rögzítését újszerű adszorpciós és szol-gél rögzítési módszerekkel. A kifejlesztett és kereskedelmi biokatalizátorokat, kinetikus rezolválások és aszimmetrikus reakciók segítségével, nagy enantiomer tisztaságú termékek előállítására használták fel. Vizsgálták racém szekunder alkoholok és aminok folyamatos reaktorokban végzett kinetikus rezolválását, dinamikus kinetikus rezolválását és további példákat vizsgáltak e témakörben a korábban benyújtott szabadalomhoz. Új, folyamatos üzemben is elvégezhető eljárást dolgoztak ki aminok ketonokból redukív aminálással történő előállítására. A MOL által bevizsgált, új biodízel adalékot fejlesztettek ki, amely megoldást jelenthet a biodízel gyártás során képződő glicerín hasznosítására. A Bunge Zrt. számára fejlesztett konjugált linolsav előállítási módszerükre magyar szabadalmi oltalmat nyertek. QM/MM számítások felhasználásával tisztázták a hisztidin és tirozin ammónia liáz és a velük rokonszerkezetű MIO-enzimek működésének mechanizmusát. *Forrás: NKFP pályázat: 25 MFt*

Soklépéses szintézissel az akridin gyűrű 9-es helyzetében karboxilcsoportot és a kiralitáscentrumokon metilcsoportokat tartalmazó új enantiomertiszta akridino-18-korona-6 étert állítottak elő, ezt savkloriddá, majd 3-trietoxiszililpropilamid származékká alakították. Ez a szelektormolekula kovalens kötéssel szférikus HPLC minőségű szilikagélhez köthető, így olyan királis állófázis nyerhető, amely alkalmas élettani szempontból fontos racém protonált primer aminok, aminosavak és származékaik, valamint egyéb racémátok rezolválására oszlopkromatográfiás úton. Fenton reakció segítségével a piridin gyűrű 4-es helyzetében hidroximetil-csoportot és a kiralitáscentrumokon metilcsoportokat tartalmazó új enantiomertiszta piridino-18-korona-6 étert állítottak elő, ennek hidroximetil-csoportját formilcsoporttá, majd karboxilcsoporttá alakították. Az előbbi származékból várhatóan jó enantiomer-megkülönböztetésre képes fluoreszcens szenzormolekula, míg az utóbbi származékból pedig racémátok rezolválására alkalmas királis állófázis szelektormolekulája fejleszthető ki. Várhatóan fontos biológiai aktivitással rendelkező új 5,7-diazaindol-2-on származékokat állítottak elő. *Források: OTKA: 8,9 MFt, EGIS: 2,3 MFt*

b) Párbeszéd a tudomány és társadalom között

A kutatási témák eredményei jelentősek az egészségügy területén. A védő ózonréteg gyengülésével jelentősen megnőtt a káros UVA és UVB sugárzás, ami a bőr korai öregedését,

bőrrákot, szembetegségeket és az immunrendszer gyengülését okozza. Ezért a fényvédő anyagok egyre jelentősebb szerepet kapnak. Ugyanígy fokozott jelentősége van a veszélyről történő tájékoztatásnak és a védekezési lehetőségek ismertetésének. A glicerint is hasznosító új biodízel adalék a fenntartható növekedés egyik lehetséges építőköve. A konjugált linolsav a természetes egészségmegőrzés egyik eszköze lehet. A heterociklus egységgel rendelkező koronaéter alapú állófázisok alkalmasak ipari vagy egyéb szennyvizekből a toxikus és/vagy értékes fémionok szelektív kinyerésére, amely mind környezetvédelmi, mind gazdasági szempontból fontos a társadalomnak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Citosztatikus hatású vegyületek: Richter Gedeon Nyrt., MTA KK, MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport, MTA-SE Pathobiokémiai Kutatócsoport. Új fényvédő hatású vegyületek: Bábolna Környezetbiológiai Közp., Servier Res. Inst. of Med. Chem., Bayer CropScience (Németország), ESTEVE (Spanyolország). Új biokatalizátorok: Fermentia Kft., BME Alkalmazott Biotechn. és Élelmiszertud. Tsz., MTA SZBK Enzimológiai Int. Folyamatos üzemű reaktorok: ThalesNano Zrt. Enzimrögzítés, ammónia-liáz enzimek: Babes-Bolyai Univ., Department of Biochem. and Biochem. Engineering (Kolozsvár), Department of Org. Chem., "Politehnica" Univ. of Timisoara (Románia), ELTE Szerves Kémia Tsz., MTA SZBK Enzimológiai Int. Koronaéterek vizsgálata: ELTE Kém. Int., MTA KK.

Felsőoktatási tevékenységek: elméleti kurzus: 12, gyakorlat: 17, PhD védés: 2 fő, doktoránsok: 12 fő, diákkörös hallgatók: 19 fő.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

4 évre elnyerték a K81127 sz. „Koronaéter-alapú szenzor- és szelektormolekulák szintézise és alkalmazása” OTKA pályázatot (5,9 MFt/év). Bekapcsolódtak a „Minőségorientált, összehangolt oktatási és K+F+I stratégia, valamint működési modell kidolgozása a Műegyetemen” című projekt szakmai célkitűzéseinek megvalósításába (ÚMFT TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002 program).

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bánóczy Z, Gorka-Kereskényi A, Reményi J, Orbán E, Hazai L, Tőkési N et al. (8): Synthesis and in Vitro Antitumor Effect of Vinblastine Derivative-Oligoarginine Conjugates. *Bioconjugate Chem.*, 21: 1948-1955 (2010)
2. Farkas R, Törincsi M, Kolonits P, Fekete J, Alonso O, Novák L: Simultaneous Displacement of a Nitro Group during Coupling of Diazotized o-Nitroaniline with Phenols. *Cent. Eur. J. Chem.*, 8: 300-307 (2010)
3. Tomin A, Hornyánszky G, Kupai K, Dorkó Z, Üрге L, Darvas F et al. (7): Lipase-Catalyzed Kinetic Resolution of 2-Methylene-substituted Cycloalkanols in Batch and in Continuous-Flow Mode Process. *Biochemistry*, 45: 859-865 (2010)
4. Székely Gy, FarkasV, Párkányi L, Tóth T, Hollósi M, Huszthy P: Crystal structures of Crown Ethers Containing an Alkyl Diarylphosphinate or a Diarylphosphinic Acid Unit. *Struct. Chem.*, 21: 277-282 (2010)
5. Móczár I, bis Peragovics Á, Baranyai P, Tóth K, Huszthy P: Synthesis and fluorescence studies of novel (azacrown ether) type chemosensors containing an acridinone unit. *Tetrahedron*, 66: 2953-2960 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	8,5	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	2
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			24
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			14
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 2	idegen nyelven:	1
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	11
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	11
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	23,76	Összes független hivatkozás száma:	202
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	257		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD: 2	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	2	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			8
		posztterek száma:	7
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			15
Témavezetések száma: TDK munka:	19	Diplomamunka (BSc):	14
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	12
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		31,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	61,0 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	9,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	25,0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	9,2 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			16,9 MFt

BME ANYAGSZERKEZETI ÉS MODELLEZÉSI KUTATÓCSOPORT

Nyulászi László, az MTA doktora
1111 Budapest, Gellért tér 4.
telefon: 1-463 1286; fax: 1-463 4052
e-mail: nyulaszi@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Az elméleti kémiai módszerekkel kombinált kísérleti (elektrondiffrakciós és spektroszkópiai) vizsgálatok segítségével molekulák szerkezetének felderítése, pontos szerkezeti információk meghatározására. Fém-halogenidok szerkezete. Ionos folyadékok és bennük N-heterociklusos karbének jelenlétének tanulmányozása. Aktinidák vegyületeinek szerkezete és elektronállapotának vizsgálata, fizikai jellemzőik meghatározása. Szokatlan szerkezetű – általában hipovalens főcsoportbeli elemeket tartalmazó – rendszerek elektronszerkezetének és stabilitásának vizsgálata, reaktivitásuk előrejelzése. Volframoxid nanoszemcsék kutatása.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Vas trihalogenidok (FeF_3 , FeCl_3 , FeBr_3 és FeI_3) monomerjeinek és dimerjeinek a szerkezetét vizsgálták kvantumkémiai módszerekkel. A kloridra a szintén elvégzett elektron diffrakciós kísérletekből kapott kötési paraméterek kiváló egyezést mutattak az elméleti úton kapott adatokkal. Rezgési jellemzőket és termodinamikai paramétereket egyaránt meghatároztak. Tárgyalták a gázfázisú és a kristályszerkezet kapcsolatát, és ebből a szempontból a kimagasló stabilitású dimer szerepét.

Meghatározták a vanádium dikloridjának és trikloridjának szerkezetét. Kvantum-kémiai számításokat végeztek a szilárd VCl_2 elpárolgatása nyomán a gőzben várható VCl_2 és VCl_3 molekulák elektronállapotaira, amely szerint négyféle VCl_3 és kétféle VCl_2 molekula jelenléte várható a magashőmérsékletű gőzben. A kvantumkémiai számítások eredményeinek felhasználásával végzett elektron diffrakciós analízis eredménye a számításokkal egyezik. A VCl_2 alapállapotában lineáris, míg a VCl_3 dinamikus Jahn–Teller hatást mutat.

Az irodalomban megjelent, az elfogadott elképzelésekkel ellentétes megállapítást felülvizsgálták, amely szerint egyes molekulák kötőhossza független a hőmérséklettől. Megállapították, hogy az állítások tévesek voltak, mivel nem vették figyelembe a rezgési módok aszimmetrikus voltát és a normálrezgések csatolásának kritikus szerepét.

Relativisztikus multikonfigurációs kvantumkémiai számításokkal meghatározták az aktinida sor első hét eleme (Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm) monoxidjainak és dioxidjainak első és második ionizációs energiáit. A sorozat tagjainak többségére, ebben a munkában lett először publikálva a molekulák alap elektronállapota. Az eredmények jó egyezést mutattak a meglévő néhány pontos kísérleti adattal és iránymutatóul szolgálnak a nagy hibatarományal rendelkező kísérleti eredmények értelmezéséhez.

Kombinált spektroszkópiai és elméleti vizsgálattal azonosították a cézium-bromid és cézium-jodid magas hőmérsékletű gőzében előforduló komponenseket. Kvantumkémiai számításokkal első ízben határozták meg a trimerek geometriai paramétereit és rezgési tulajdonságait.

Monoklin (m-) és hexagonális (h-) szerkezetű WO_3 nanoszemcséket állítottak elő, melyeket XRD, SEM és Raman módszerekkel tanulmányoztak, majd gázszenzorként tesztelték. Sikertült a h- WO_3 -ból olyan gázszenzort készíteniük, amely abszolút szelektív H_2S szenzor volt H_2 , CH_4 , NO és CO gázok jelenléte mellett 200 °C-on.

Részt vettek két új kobalt(III)-komplex, a transz-bisz(metil-etil-dioximáto)-kloro- β -pikolin-kobalt (III) és a transz-bisz(metil-etil-dioximáto)-kloro-3,4-lutidin-kobalt (III) komplexek előállításában, termikus tulajdonságainak felderítésében (TG/DTA-MS) és szerkezetének meghatározásában (egykristály és por XRD, FTIR, ESI-MS).

Tanulmányozták a (\pm)-transz-1,2-ciklohexándiol rezolválásában kulcsfontosságúnak bizonyult kokristályt, a transz-(R,R)-1,2-ciklohexándiol és az (R,R)-borkősav 1:1 mólarányú kokristályát. Egykristály XRD módszerrel meghatározták a kristályszerkezetét. A kokristály termikus tulajdonságait TG/DTA és DSC módszerekkel vizsgálták és elkészítették a transz-(R,R)-1,2-ciklohexándiol, transz-(S,S)-1,2-ciklohexándiol és az (R,R)-borkősav háromkomponensű fázisdiagramját.

DFT számításokkal vizsgálták különböző savmaradék anionok protonaffinitását és megállapították, hogy az imidazólium kationból és savmaradékból összeálló ionpár disszociációs energiája, a megfelelő savra valamint imidazol-2-ilidénre, együtt csökken a növekvő protonaffinitással. Ilyen ionpárok állnak elő ionos folyadékok elpárologtatása során. A kis disszociációs energiával rendelkező rendszerek (melyek közé tartoznak a szerves savakból - például ecetsavból - levezethető ionpárok) esetén, a számítások alapján létezik stabil sav-karbén komplex. Ezt a szerkezetet etil-metil-imidazólium-acetát ionos folyadék gőzeinek ultraibolya fotoelektron-spektroszkópiai vizsgálatával sikerült kimutatniuk. Nagyobb vákuum alkalmazása esetén tömegspektroszkópiai vizsgálattal egyértelműen sikerült kimutatni a szabad N-heterociklusos karbént és az ecetsavat. A munkát a BASF SE támogatta.

A szililének (hipovalens szilíciumvegyületek) egy új családját jósolták meg mint lehetséges szintetikus targetet izodezmikus reakciók, dimerizációs reakciók, szinglet-triplet felhasadás és a nukleofilicitás valamint az elektrofilicitás vizsgálata alapján. A szililént kén-nitrogén fragmens stabilizálja. A javasolt molekula érdekessége, hogy a szinglet és triplet állapotot egyaránt stabilizálja a kén-nitrogén fragmens.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tevékenysége során mindig is fontos szerepet játszott a tudományos teljesítmény értéke, ezen értékeknek a tudósok személyiségével együtt történő bemutatása, és mindennek a társadalom széles rétegeivel történő megismertetése és elismertetése. Fontos aspektusként szerepel a kutatónők szerepe. A fentiek szellemében összesen hat ismeretterjesztő jellegű tanulmányt jegyez a kutatócsoport a 2010-es évben. A fentiekén túl, a kutatócsoport témaválasztásában keresi az olyan problémák megoldását, amelyek kapcsolódhatnak az emberiség globális problémáinak megoldásához, így például környezettudatosabb technológiák kialakításához. Ide tartoznak az iparvállalatokkal történő együttműködések, melyek során a 2010-es évben alapkutatás jellegű tevékenységet végeztek két iparvállalat (a BASF SE és a General Electric) részére.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport vezetése 2010 szeptember 1-től megváltozott, a korábbi vezető 2011 január 1-től a kutatócsoportban kutatóprofesszor. A kutatócsoport egyik tagja 2010 májusa óta a JRC, Institute for Transuranium Elementsben (Karlsruhe, Németország) dolgozik, egy másik tagja pedig 2010 februárja óta a Helsinki University Institute of Inorganic Chemistry vendégkutatója Marie Curie ösztöndíjjal.

Szoros együttműködést folytattak a következő külföldi egyetemekkel és intézménnyel: Massey University, Auckland, New Zealand; University of Michigan, Ann Arbor, MI, U.S.A.; University of Rome; University of L'Aquila (Olaszország); Urenco Netherland, B.V.

Ipari partnerekkel való együttműködésben kiemelendő a BASF SE-vel (Ludwigshafen/Rhein, Németország) ionos folyadékok szerkezetének vizsgálatával kapcsolatos munka, valamint a General Electric számára végzett volfram- és higanykutatás.

A BME-n folyó oktatásban a kutatócsoport tagjai alapkursusok megtartásától (Általános Kémia, Szervetlen Kémia, Kémia) kics csoportos laborgyakorlatokon és szemináriumokon keresztül választható tárgyakig (Nagy kémiai felfedezések, Szesz-kultúra) vesznek részt. A kutatócsoport négy tagja az Oláh György Doktori Iskola törzstagja és a kutatócsoport előző vezetője volt az Iskola korábbi vezetője, míg a kutatócsoport jelenlegi vezetője az Iskola mostani vezetője.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A korábban megkezdett FP7 211690, OTKA K-60365 és OTKA K-75972 kutatások mellett az egyik tag Marie Curie (MC) ösztöndíjat nyert (23 Mft) Helsinkii Egyetemen való tartózkodására.

A BASF SE-vel 120 000 EUR (32 Mft), a GE Hungary ZRt-vel 3 Mft értékben kötöttek megbízási szerződést.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Varga Z, Kolonits M, Hargittai M: Gas-Phase Structures of Iron Trihalides: A Computational Study of all Iron Trihalides and an Electron Diffraction Study of Iron Trichloride. *Inorg. Chem.*, 49: 1039-1045 (2010)
2. Varga Z, Vest B, Schwerdtfeger P, Hargittai M: Molecular Geometry of Vanadium Dichloride and Vanadium Trichloride: A Gas-Phase Electron Diffraction and Computational Study. *Inorg. Chem.*, 49: 2816-2821 (2010)
3. Infante I, Kovacs A, La Macchia GA, Shahi RM, Gibson JK, Gagliardi L: Ionization energies for the actinide mono- and dioxides series, from Th to Cm: theory versus experiment. *J. Phys. Chem. A*, 114(19): 6007-6015 (2010)
4. Hollóczki O, Gerhard D, Massonne K, Szarvas L, Németh B, Veszprémi T, Nyulászi L: Carbenes in Ionic Liquids: A Viable Mechanism for Evaporation. *New. J. Chem.*, 34: 3004-09 (2010)
5. Olah J, Veszprémi T, Woollins D, Blockhuys F: Combining the Chemistries of silylene and sulfur-nitrogen compounds – SiS₂N₂ and related systems. *Dalton Transactions*, 39: 3256-3263 (2010)
6. Varga Z, Hargittai M, Bartell LS: On the Thermal Expansion of Molecules. *Struct. Chem.*, 22: 111-121 (2011) DOI 10.1007/s11224-010-9699-2 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	9	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	3
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			35
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			27
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven: 26
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 26
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	50,13	Összes független hivatkozás száma:	539
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	890		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			5
		posztterek száma:	1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	3

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		34,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	74,7 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	1,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	36,7 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			36,5 MFt

BME FÉMTECHNOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

Ginsztler János, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Bertalan Lajos utca 7.
telefon: 1-463 2954; fax: 1-463 3250
e-mail: matsci@eik.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

- Az endovaszkuláris terápiában alkalmazott implantátumok anyagainak és bevonatainak kutatása.
- A növelt hőmérsékleten üzemelő szerkezeti anyagok szemcsehatárain lezajló folyamatok kutatása.
- A szintaktikus fémhabok infiltrációs folyamatainak kutatása.
- A duplex acélok hegeszthetőségének kutatása, a réz–réz hegesztett kötések lézersugaras technológiájának fejlesztése.
- A pébégáztartályok maradék élettartamának meghatározására alkalmas szakértői rendszer kifejlesztése.
- Részvétel az anyagtudományi és anyagtechnológiai tantárgyak oktatásában, a károsodásanalízis szakterületére eső ipari K+F+I feladatok végzésében és bekapcsolódás a BME Nanoprojekt kutatási programjába.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az értágítóbetétek anyagainak fejlesztése terén kifejlesztettek egy Nitinol alapanyagú, tágított állapotában is csak 1,0 mm átmérőjű, öntáguló sztentet. Ennek lézersugaras vágási technológiáját és elektrokémiai felületkezelését is kifejlesztve, kutatási partnereikkel együtt megkezdték az új sztentek állatkísérletekben – patkányok carotis-ába implantálva – való klinikai tesztelését. Az eredményt 12 fős kutatócsoport érte el, akik közül 4 fő dolgozott a kutatócsoportban, közülük 1 fő sikeresen megvédte PhD-értekezését. Együttműködő partnerek: Semmelweis Egyetem Humán Élettani Intézet Szövetépítő Laboratórium, Labor der Experimentellen Herzchirurgie, Universitätsklinikum Heidelberg.

Az ausztenites acélok szemcsehatár-tulajdonságainak tanulmányozásával igazolták, hogy termomechanikus kezelésekkel a szemcsehatárok korróziós ellenállása jelentősen fokozható. Új összefüggéseket tártak fel a forrasztás közben jelentkező, fémolvadékok okozta szemcsehatár-erózió kristályorientációval való kapcsolatáról. Az eredményt 4 fős kutatócsoport érte el, akik közül 2 fő dolgozott a kutatócsoportban. Együttműködő partnerek: Miskolci Egyetem Mechanikai Technológiai Tanszék, Linde Gáz Magyarország Kft.

Meghatározták az alumínium mátrixú szintaktikus fémhabok határfelületi stabilitását befolyásoló gyártási és anyagszerkezeti tényezőket. Olyan dupla kompozit szerkezeti anyagot fejlesztettek ki – elsőként a világon –, amelynek mátrixa maga is alumínium mátrixú szintaktikus fémhab, erősítőanyaga pedig alumínium mátrixú, kerámiaszál erősítésű kompozithuzal. A kutatási témában megvédett PhD-értekezés témavezetője a kutatócsoport tagja.

Az eredményt 5 fős kutatócsoport érte el, akik közül 2 fő dolgozott a kutatócsoportban. Együttműködő partnerek: MTA KK, Bay-Nano Intézet.

Ipari és kutatási partnerekkel közösen elkezdtek az új generációs (Ni-szegény és Mo-mentes) duplex acélok heterogén kötéseinek hegeszthetőségének kutatását. Igazolták, hogy a kevésbé túllöttyözött hegesztőanyagok is alkalmasak a megfelelő ausztenittartalom biztosításához, a volfrámelektrodás hegesztés aktiválóporos változatában.

Az eredményt 3 fős kutatócsoport érte el, akik közül 1 fő dolgozott a kutatócsoportban.

A réz-réz hegesztett kötések fejlesztése terén kifejlesztették a dudorhegesztésnél jobb varratjellemzőket biztosító lézersugaras hegesztési technológiát, amelynek szabadalmaztatása az ipari partnerrel 2011-ben várható.

A pébégáztartályok károsodási folyamatainak elemzése alapján, a Pébé-Coop Kft.-vel együttműködve új szakértői rendszert fejlesztettek ki a tartályok maradék élettartamának meghatározására; ennek eredményei a tartályok időszakos ellenőrzésére vonatkozó hatósági szabályozásba is beépültek.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tevékenysége nagyszámú gépészmérnök egyetemi hallgató oktatásával azonos szinten folyik. A kutatócsoport a tanszékekkel közösen megnyitotta a laboratóriumait a diákok előtt, bevonta őket a kutatási feladatok anyagvizsgálati és technológiafejlesztési részfeladataiba, és szakmai diákkörök (pl. Hegesztési Szakosztály, Kovácsolási Szakosztály) tevékenységét támogatta. Mindennek köszönhetően több mint 100 diák került közvetlen kapcsolatban azokkal a kutatási feladatokkal, amelyeken a kutatócsoport 2010-ben dolgozott.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport szoros együttműködést folytatott az INSA de Lyon MATEIS laboratóriumával: ennek keretében 3 hazai kutató két alkalommal dolgozott Lyonban, és 3 francia kutató Budapesten.

A vállalati együttműködések keretében elért eredmények alapján szabadalmi bejelentés várható az FCI Connectors Hungary Kft.-vel. A Pébé-Coop Kft.-vel közösen elért eredmények alapján megkezdődött a pébégáztartályokra vonatkozó hatósági szabályozások korszerűsítése.

A kutatócsoport tagjai 8 egyetemi tantárgy előadásait tartották, témavezetésükkel 2 PhD-értekezés sikeres védeése történt meg, és további 4 PhD hallgató fejezte be a szervezett doktori képzést.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A beszámolási évben a kutatócsoport nem nyújtott be és nem nyert el új pályázatot.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Magasdi A, Ginsztler J, Dobránszky J: Fatigue of laser beam welded joints of high-carbon steel strips. Materials Science Forum, 659: 61-66 (2010)

2. Puskás Zs, Toldy ÁI, Ginsztler J: Measuring the heparin binding capability of polyurethane-coated stainless steel stents with a label-free biosensor. *Materials Science Forum*, 659: 331-335 (2010)
3. Gaál Z, Szabó PJ, Ginsztler J, Dévényi L: Grain boundary investigation of AISI 304 type steel using EBSD. *Materials Science Forum*, 659: 307-311 (2010)
4. Prohászka J, Mamalis AG, Gaál Z: The effect of the elastic and plastic anisotropy on the elastic-plastic deformation region. *J. Machining and Forming Technologies*, 2: 1–7 (2010:3-4)
5. Orbulov IN, Kientzl I, Blücher J, Ginsztler J, Németh Á, Dobránszky J: Production and investigation of a metal matrix composite pipe. In: *Proceedings of the 14th European Conference on Composite Materials*. Budapest, 2010.06.07-10. Budapest: 1-8. Paper 262-ECCM14.
6. Cazottes S, Verdu C, Szabo PJ, Kleber X, Ginsztler J, Dobransky J: Microstructure and deformation process of welded lean duplex stainless steels. In: Charles J (ed.) *Duplex World 2010 Conference Proceedings*. Beaune, 2010.10.13-15. KCI Publishing, 1-8. Paper IV.C.3.
7. Kleber X, Verdu C, Cazottes S, Dobransky J, Ginsztler J: Aging behaviour of lean duplex steel using Thermoelectric Power measurements. In: Charles J (ed.) *Duplex World 2010 Conference Proceedings*. Beaune, 2010.10.13-15. KCI Publishing, 1-7. II.A.9.
8. Sándor T, Dobránszky J: Microstructural properties of the heterogeneous welded joints of LDX2101 and AISI 304 stainless steels. In: Charles J (ed.) *Duplex World 2010 Conference Proceedings*. Beaune, 2010.10.13-15. KCI Publishing, 1-12. II.C.9.
9. Takács T, Bognár E, Dobránszky J: Az újraszűkülést befolyásoló műszaki paraméterek vizsgálata coronariastenteken. *Lege Artis Medicinae*, 20(3–4): 227-233 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Fémtechnológiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	5,5	Ebből kutató ² :	2,5
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			28
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			28
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	3	idegen nyelven:
			0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
			7
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:
			1
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	0,35	Összes független hivatkozás száma:	24
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	33		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			8
		posztterek száma:	10
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	8
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		22,6	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	29,3
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	29,3
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0

BME FIZIKAI GEODÉZIA ÉS GEODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT

Ádám József, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
telefon: 1-463 3222; fax: 1-463 3192
e-mail: jadam@sci.fgt.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A Föld nehézségi erőterének globális meghatározása és vizsgálata műholdas gravimetria, gradiometria és földfelszíni gravimetriai, Eötvös-inga mérések segítségével

Az Eötvös-inga méréseket asztrogeodéziai függővonal-elhajlás, nehézségi rendellenesség és GPS/szintezési adatokkal, valamint a legújabb nagy felbontású EGM2008-as geopotenciális modellel és az SRTM digitális domborzatmodellből számított RTM korrekciókkal kombinálták a kvázigeoid magyarországi felületdarabjának LKN kollokációval történő meghatározása céljából. A GPS/szintezési és EGM2008-ból számított kvázigeoid undulációk különbségében az ország keleti részén egy erőteljes É-D irányú trend jelentkezik, amely összhangban van az EOMA újramérésének eredményeivel az első három poligonban.

Az EOMA magassági alaphálózat újramérését támogatandó, terepi gravimetriai vizsgálatokat végeztek. Egy síkvidéki, egy dombvidéki és egy hegyvidéki teszterületen végzett mérések alapján meghatározták a magassági alaphálózat számára szükséges gravimetriai mérések sűrűségének igényét. Eredményeik szerint az állami földmérés által javasolt megoldás nem megfelelő, a mérések helyét a nehézségi erőter formáinak figyelembevételével, a szintezési vonal futásától függetlenül kell tervezni.

Globális nehézségi erőter modellt határoztak meg a CHAMP műhold két éves mérései alapján. A megoldás a newtoni mozgásegyenletek alapján, egy általuk kidolgozott módszerrel történt. Az eredmények megfelelnek az előzetes ismereteiknek, de felülmúlni nem tudták azt, így a kidolgozott eljárás elsősorban elméleti jelentőségű.

Folytatták a nehézségi erőter 3D potenciálfüggvényének inverziós előállításával kapcsolatos kutatásaikat is, és elkezdték a kidolgozását egy olyan algoritmusnak, amellyel a bemenő adatokhoz megfelelő súlyfüggvényeket tudnak rendelni.

Egyszerűsített zenitkamera-rendszert dolgoztak ki, mellyel (egyelőre a geodéziai felhasználás szempontjából nem elégséges pontossággal) földrajzi helymeghatározás végezhető. A prototípussal végzett mérések feldolgozására evolúciós algoritmus elvén működő feldolgozórendszert fejlesztettek ki. Az evolúciós algoritmus alkalmazását ezen kívül kiterjesztették a geodéziai hálózatok pontossági tervezésének problémakörére is.

A földi nehézségi erőter időbeli változásainak vizsgálata gravimetriai műholdak, földfelszíni gravimetriai és Eötvös-inga mérések alapján

Eötvös-inga mérésekkel kapcsolatos kutatásokra az egyetem területén új gravitációs laboratóriumot alakítottunk ki. Az itteni kutatásaikat két témára fókuszálták: egyrészt a Duna változó víztömege által okozott időbeli változás kimutatására, másrészt kutatásokat és méréseket végeztek az inga csillapodási idejének csökkentésére. A nyugalmi helyzet becslésére két különböző megoldással próbálkoznak: a Navier-Stokes egyenletek végesesemes megoldásán alapuló áramlási modell felhasználásával, és a differenciális evolúciós algoritmus alkalmazásával.

A GNSS-technikával történő helymeghatározás pontosítása

A GNSS mérések alapján történő operatív vízgőzbecslések végrehajtásához elkészítették a közel valószerű GPS feldolgozórendszert, amely óránként feldolgozza a hazai aktív hálózat állomásainak észlelését, kiegészítve a Közép-Európában található EUREF és IGS állomások adataival. Ez mintegy 86 állomás adatainak feldolgozását jelenti. Hazánkban ezzel több, mint 50 pontban óránként határozzák meg a troposzféra nedves késleltetésének értékét, amelyből a meteorológiai előrejelzésekhez felhasználható integrált vízgőztartalom meghatározható. A feldolgozórendszer első eredményeit összehasonlítva rádiószondás adatokkal kiderült, hogy megfelelő feldolgozás esetén akár 1 mm-es középhibát is elérhetnek.

A troposzféra GNSS mérésekre kifejtett hatásának vizsgálata során előállítottak egy lokális troposzféra modellt, amely bár csak kismértékű javulást okozott a troposzféra okozta késleltetés modellezésében, a korábban alkalmazott modelleknél megfigyelhető erős szezonális hatást teljesen kiküszöbölte.

A felszínmozgás monitorozása GPS- és radaros földmegfigyelő műholdak segítségével

A 2010-es évben elvégezték az MGGA GPS geodinamikai hálózat eddigi adatainak előzetes kiértékelését. Kidolgozták a magyarországi felszínmozgások optimális feltérképezésének koncepcióját, amelyben egy kétkomponensű űrtechnikás (műholdradaros PSI/SBAS országos sebességtérkép és egy országos GPS kéregmozgás sebességtérkép) optimalizált kombinációs megvalósítást tartják megfelelőnek. A közép-európai geodinamikai vizsgálatokat és az azzal járó nemzetközi kooperációt folytatták.

A korábban elkészített PS-InSAR webes információs rendszert tovább fejlesztették, több új funkcióval látták el és felkészítették további adatcsomagok beépítésére. Elvégezték a Bamban történt 2003-as földrengés DInSAR feldolgozását, kiértékelését és értelmezését. A többtechnikás felszínmozgás monitorozás keretében Debrecenben GPS kampányt, a visontai bánya környezetében szabatos szintezést szerveztek. A 2010. október 4-én átszakadt vörösiszap-tározó gátjainak múltbeli stabilitás- és mozgásvizsgálatát elvégezték PSI technikával a teljes ENVISAT ASAR adatokon (2003-2010).

Különböző numerikus algoritmusok (neurális hálózatok, compressive sampling, diszkrét wavelet transzformáció, különböző báziskeresési algoritmusok, nem-lineáris illesztési algoritmusok) felhasználásával eljárásokat fejlesztettek ki teljes hullámalakos légi lézerszkenner adatok feldolgozására (adattömörítés, osztályozás, csúcskeresés).

A VLBI-technika alkalmazásai

A különösen nagy felbontású rádió-interferometria (VLBI) technikáját alkalmazták az égi vonatkoztatási rendszert kijelölő, valamint más kompakt rádiósugárzó égitestek szerkezetének vizsgálatára. Közel megduplázták az ismert legtávolabbi ($z > 4,5$ vöröseltolódású) rádiókvazárok VLBI-vel felmért mintáját. Kimutatták, hogy ezek egy része kevésbé kompakt, és eltérő spektrális tulajdonságokkal rendelkezik, mint a relativisztikus nyalábolással jellemezhető közelebbi aktív galaxismagok. Emiatt nem mindegyikük lenne alkalmas égi referenciapontnak sem. Az amerikai VLBA antennahálózat mérései és más adatok alapján, több független módszerrel meghatároztuk a J1430+4204 jelű aktív galaxismag pontos fizikai tulajdonságait. Az Európai VLBI Hálózattal (EVN) két, magdominálta hármas szerkezetet mutató távoli kvazárról megállapították, hogy szerkezetük magyarázatához nincs szükség extrém körülmények (pl. leálló majd újrainduló kvazáraktivitás) feltételezésére. Ugyancsak az EVN-nel két frekvencián megfigyelték a ma ismert legtávolabbi rádiósugárzó kvazárt (J1429+5447, $z=6,21$). A következő generációs űr-VLBI mesterséges holdak közül a japán ASTRO-G számára potenciális, eddig nem vizsgált kalibrátor rádióforrásokat kerestek. Az orosz RadioAstron esetében vizsgálták az űr-VLBI nagy pontosságú gyakorlati geodéziai alkalmazásának lehetőségét, és kimutatták, hogy ehhez a feltételek kedvezőtlenek lesznek. A VLBI mesterséges holdak esetében fontos az erősen elnyúlt pálya minél pontosabb ismerete, amihez nagy pontosságú numerikus módszerekre van szükség. A Zare-féle regularizációs eljárás alkalmazása során azt tapasztalták, hogy mind körpálya (GPS holdak), mind nagy excentricitású pálya (VLBI holdak) esetén 4-5 nagyságrenddel csökkent a numerikus hiba, és két-háromszorosára gyorsult az integrálás.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az általuk kialakított operatív vízgőzbecslést végző GPS feldolgozórendszer gyakorlati haszna, hogy mintegy 60 km-es térbeli és óránkénti időbeli felbontással tudja előállítani a troposzférában felgyülemlett vízpára mennyiségét. Ezzel remekül kiegészíti a jelenleg Budapesten 12 óránként, és Szegeden 24 óránként végzett rádiószondás észleléseket.

InSAR műholdradaros vizsgálatuk alapján kiderült, hogy bár az ajkai vörösiszap-tározó közvetlen környezete általánosan igen stabil, a X. számú vörösiszap-tározó gátja -1 cm/évet is meghaladó sebességű mozgásokat mutatott a 2003-2010-es időszakban, a legnagyobbat az átszakadás helyén. Helyi monitorozással is a mozgások kimutathatók lettek volna, ami a veszélyre utalhatott volna.

A távoli kvazárok VLBI megfigyelései alapján fenntartott kvázi-inerciális vonatkoztatási rendszer (ICRF) a földforgás pontos, hosszú távú mérésének egyetlen eszköze. Így nem csak a csillagászati és felsőgeodéziai észlelések, de a mindennapi életben is használt műholdas hely- és időmegtározó rendszerek (GNSS) számára is nélkülözhetetlen.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Rendszeresen publikálnak színvonalas hazai nyomtatott (Élet és Tudomány, Mérnök Újság), ill. internetes (pl. Úrvilág, hirek.csillagaszat.hu) tudományos ismeretterjesztő kiadványokban.

Jelentős szerepet vállaltak a pécsi kulturális főváros programjainak keretében rendezett „Az Eötvös-ingától a GOCE műholdig” elnevezésű kiállítás szakmai előkészítésében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Aktív szerepvállalások: Joint Institute for VLBI in Europe (JIVE), Dwingeloo, Hollandia, COST MP0905 "Black holes in a violent Universe" (menedzsment bizottság), CEGRN Consortium (titkári tevékenység), Consortium Governing Board, GMES TerraFirma Magyarország (magyarországi képviselő), IAG Communication and Outreach Branch.

Élő együttműködések: Max Planck Rádiócsillagászati Intézet, Müncheni Műszaki Egyetem, Grazi Műszaki Egyetem, Karlsruhei Egyetem, Stuttgarteri Egyetem, Shanghai Astronomical Observatory, Istituto di Radioastronomia, Ohio State University Center for Mapping, ELTE Csillagászati Tanszék, MTA Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA K-83909: A levegő integrált vízgőztartalmának meghatározása GNSS adatokból
NKTH Magyar Űrkutatási Iroda URK10367: Integrált GNSS kéregmozgás-vizsgálat (támogatásra ítélt, de ki nem hirdetett pályázat, pályázati struktúrális átalakítás miatt)

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Paragi Z, Taylor GB, Kouveliotou C, Granot J, Ramirez-Ruiz E, Bietenholz M, van der Horst AJ, Pidopryhora Y, van Langevelde HJ, Garrett MA, Szomoru A, Argo MK, Bourke S, Paczynski BA: A mildly relativistic radio jet from the otherwise normal type Ic supernova 2007gr. *Nature*, Vol. 463, 516-518 (2010)
2. Laky S, Zaletnyik P, Toth C: Land classification of wavelet-compressed full-waveform LiDAR data. *International Archives of the Photogrammetry Remote Sensing and Spatial Information Sciences XXXVIII:(3A)* 115-119. (2010)
3. Frey S, Paragi Z, Gurvits L I, Cseh D, Gabányi KÉ: High-resolution images of five radio quasars at early cosmological epochs. *Astronomy and Astrophysics*, Vol. 524, id. A83 (2010)
4. Nagy I, Süli Á, Érdi B: Stability of the orbit of a third body in binary asteroid systems. *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 218, Issue 1, 012017 (2010)
5. Frey S, Paragi Z, Campbell RM, Moór A: The radio-loud active nucleus in the "dark lens" galaxy J1218+2953. *Astronomy and Astrophysics*, Vol. 513, id. A18 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	5	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			56
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			49
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	3	idegen nyelven: 2
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 26
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 12
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 1
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	76,67	Összes független hivatkozás száma:	16
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	16		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			9
		posztterek száma:	7
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			9
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	0

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		21,7	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	20,9 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		15,6	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,5 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3,8 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

BME GÉPEK ÉS JÁRMŰVEK DINAMIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Stépan Gábor, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 5.
telefon: 1-463 1369; fax: 1-463 3471
e-mail: stepan@mm.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Gépek és járművek stabilitási- és rezgésvizsgálata kapcsán a marási folyamat felületi minőség és termelékenység szempontjából történő optimalizálása, valamint a járműkerekek rezgéseinek analízise volt a két legfontosabb feladat. Új eredmény az adott felületi minőséghez tartozó legnagyobb termelékenységet biztosító fogásmélység számítására használható számítási módszer kísérleti ellenőrzése, és annak megmutatása, hogy hullámos élű marószerszámmal a hagyományos szerszámoknál sokkal nagyobb termelékenységet lehet elérni kisebb energiafelhasználás mellett. A gumiabroncs rezgések kapcsán a fejlesztés a korábbi eredmények valós ABS rendszerekben történő alkalmazására irányult.

A elektronikus menetstabilizáló rendszerek *számítógépes szabályozással* működnek. Ebben a témakörben a folytonos és diszkrét idejű rendszerek együttműködése során adódó jelenségek modellezése, a szabályozott, több összekapcsolt testből álló rendszerek vizsgálata és az ún. alulaktuált robotok mozgásának leírására használható algoritmus kidolgozása volt a három fő feladat. Az elméleti eredményeket egy digitális szabályozású, alulaktuált és redundáns szerviz robot pálya menti pozíciószabályozásának kidolgozása során sikerült alkalmazni.

Járműalkatrészek tönkremenetelének vizsgálata kapcsán folytatódott az ún. Portevin-Le Chatelier (PLC) hatás tanulmányozása. A jelenség bekövetkezése a felületi minőség drasztikus romlásához vezet a nagy deformációval járó technológiák (pl. marás) alkalmazásakor. A lefolytatott vizsgálatok ismét megerősítették, hogy a PLC hatás kialakulásában az ún. negatív rate-dependence jelenség szerepe az elsődleges a mikromechanikai hatásokkal szemben.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A gépek és járművek stabilitási- és rezgésvizsgálata témakörben a marási folyamat vizsgálata került előtérbe. Fémek megmunkálása során a két legfontosabb szempont a felületi minőség és a termelékenység. A kutatócsoportban korábban elvégzett számításokkal sikerült meghatározni a megkívánt felületi minőség mellett maximális termelékenységet biztosító optimális axiális fogásmélységet, csavart élű marószerszám alkalmazása esetén. A beszámolási évben ennek az eredménynek a kísérleti ellenőrzése és több szabadsági fokra való általánosítása történt meg. Ez az eredmény nagy gyakorlati jelentőséggel bír, hiszen könnyen alkalmazható a gyártási folyamat termelékenységének növelésére. Azokban az esetekben is korlátozott a fogásmélység, amikor a felületi minőség nem elsőrendű szempont. Túl nagy fogásmélység esetén káros rezgések alakulhatnak ki, melyek tönkretehetik a szerszámgépet és a szükséges teljesítmény többszörösét emésztik fel. Ilyenkor a szerszám néha kilép, majd ismét belevág az anyagba. Az eredmények szerint ez a viselkedés kaotikus is lehet, amit a tapasztalt felületi mintázatok is megerősítenek. Fontos eredmény, hogy hullámos élű marószerszámmal a hagyományos szerszámokhoz képest mélyebben és kisebb vágóteljesítménnyel lehet vágni, káros rezgések megjelenése nélkül. A vizsgálatok részét képezte egy, a marás során fellépő rezgések frekvenciáinak meghatározására szolgáló eljárás kidolgozása és nemlineáris modell felállítása a marási folyamat pontosabb leírására. A felületi minőséget ún. élszak képződése is leronthatja. A forgácsolásra korábban felállított termomechanikai modellt kiegészítve az élszak képződését modellező egyenlettel, sikerült kimutatni kaotikus rezgések megjelenését.

Folytatódott a száraz súrlódású, harmonikusan gerjesztett lineáris oszcillátor vizsgálata olyan paramétertartományokban, ahol a tapadási és csúszási súrlódási együtthatók nem egyenlők. Ebben az esetben olyan megoldások is megjelennek, melyek spektruma és Ljapunov-exponense egyértelműen ezek kaotikus jellegére utal. A vizsgálatok eredményei a fékberendezések fejlesztése során hasznosulhatnak.

A jelenlegi ABS és ESP rendszerek továbbfejlesztésének egyik lehetséges útja a kutatócsoport által kifejlesztett gumikerék modell azokban történő alkalmazása. A számítási idő csökkentésére a szimulációs kód C++ nyelven került implementálásra. A program eredményei összhangban vannak a mérési eredményekkel. A vizsgálatok szerint a megcsúszás figyelmen kívül hagyásával a valós időbeli szimulációk nagy biztonsággal elvégezhetők. A megcsúszásokat is figyelembe véve azonban a számítási idő sokszorosára nő.

Számítógéppel szabályozott rendszerekben gyakran folytonos és diszkrét idejű alrendszerek működnek együtt. Ehhez kapcsolódó alapkutatási irány a diszkrétizálásból adódó anticipatív jelleg, és a rendszerekben jelentkező késleltetés egymásra kifejtett hatásának vizsgálata nemlineáris dinamikai rendszerekben. Az elért eredmények szerint a stabil tartomány belsejében a késleltetés, illetve anticipatív hatás nincs lényegi befolyással a működésre, és a numerikus szimuláció érdekében elvégzett diszkrétizációnál a késleltetés akár el is tűnhet.

Az alkalmazásorientált kutatás elsősorban a sok összekapcsolt merev testből álló (multibody) rendszerek egyenletrendszerének matematikailag könnyen kezelhető felírási módszerére irányult ezen a területen. A legcélszerűbb eljárásnak a Descartes-féle koordináták alkalmazása tűnik, de ez olyan differenciál algebrai egyenletrendszer felírásával jár, melynek numerikus megoldása körülményes. A kutatócsoport tagjai összehasonlítottak három módszert a szakirodalomban megtalálható megoldási módszerek közül: a) transzformáció minimális számú koordinátára, b) projekció a kényszerek által meghatározott altérre, c) a geometriai kényszeregyenletek átalakításával közönséges differenciálegyenlet-rendszer felépítése. A tapasztalatok alapján az a) és b) módszerekkel nagyobb számítási pontosság érhető el, azonban a számítási igény jelentősen meghaladja a c) módszerét.

A 2010-ben zárult ACROBOTER projekt kapcsán került előtérbe az alulaktuált (under-actuated) robotok szabályozása, ahol nincs minden szabadsági foknak megfelelő beavatkozási lehetőség. Eddig nem létezett általános, alulaktuált rendszerekben alkalmazható számítási algoritmus. A kutatócsoportban általánosították az úgynevezett kiszámított nyomaték szabályozás módszert, és létrehoztak egy numerikus algoritmust, amely tetszőlegesen összetett rendszer esetében használható. A szabályozási algoritmus sikeresen működött az ACROBOTER projektben. A módszer további kísérleti ellenőrzése folyamatban van.

Járműalkatrészek tönkremenetelével kapcsolatban folytatódott a Portevin-Le Chatelier jelenség hátterének vizsgálata. Az eredmények azt mutatják, hogy a mikromechanikai hatásokat modellező Cottrell-Bilby-Louat egyenletnek csak a dinamikus bifurkációval kialakuló lengések frekvenciájának hangolásában van szerepe. Az instabilitás felléptében viszont az ún. negatív rate-dependence jelenség szerepe a döntő. Az anyagmodellezésben új kutatási terület a termo-mechanikai problémák vizsgálata. A kutatócsoportban feltételeket foglalmaztak meg arra vonatkozóan, hogy mikor válnak szét a termodinamikai és a mechanikai folyamatok leírására adódó egyenletek, és mikor kell ezeket kapcsolatosan tárgyalni.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport egyik tagja Junior Prima díjat kapott Magyar Oktatás és Köznevelés kategóriában, ennek kapcsán rádióbeszélgetésen vett részt a Klub rádió Szerepvállalás c. műsorában. Egy másik kutatócsoport tag második helyezést ért el a BME Egyetemi Habilitációs Bizottság és Doktori Tanács pályázatán. Ennek kapcsán a BME honlapján közzétették a pályázati anyagot (<http://doktori.bme.hu/>), amely közérthetően bemutatja a kutatócsoport egyik kutatási területét és elért eredményeit. A kutatócsoport tagjai aktívan

részt vettek a BME egyetemi nyílt napon, ahol számos középiskolás diák érdeklődését sikerült felkelteni a műszaki tudományok iránt. A Kutatók Éjszakája programsorozatban tudományos előadással vett részt a kutatócsoport, az időkésleltetett rendszerek stabilitásával igazolt fantom (látszólag ok nélküli) forgalmi dugók kialakulásáról. Ugyanez bekerült az Index hírportálon az utóbbi 10 év 10 legjelentősebb magyar tudományos eredménye közé, és az MTA honlapján is megjelent.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

- *Új felsőoktatási kapcsolat:* Leibniz Egyetem Szerszámgép és Gyártástechnológia Tanszék, Hannover, Németország.
- *Nemzetközi konferenciák szervezése:* 1) IUTAM (International Union of Theoretical and Applied Mechanics) Symposium on Dynamics Modeling and Interaction Control in Virtual and Real Environments, Budapest, 2010. 2) Continuum Physics and Engineering Applications Conference, 2010, Ráckeve. 3) Thermal Stresses 2011 Congress, general chair.
- *Új ipari kapcsolat:* Ideko Technological Centre, Elgoibar, Gipuzkoa, Spanyolország.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Két 2010-ben benyújtott és elnyert, 2011-ben induló OTKA pályázatban vezető kutatóként illetve társ kutatóként vesz részt a kutatócsoport egy tagja. A projektek címe “Szakaszosan sima matematikai modellek a gépészmérnöki gyakorlatban” és “Kemény felületek nagy pontosságú forgácsolásának modellezése és dinamikai vizsgálata”. A kutatócsoport több tagja is részt vesz a DYNXPERS (http://www.dynxperts.eu/) projektben, mely 2010-ben indult 11 partner intézmény részvételével. A projekt célja olyan érzékelőkkel ellátott marófejek kifejlesztése, melyek segítenek az optimális marási paraméterek kiválasztásában.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Béda PB: On modeling of Portevin - Le Chatelier effect. Materials Science Forum, 659: 367-371 (2010)
2. Csernák G, Stépán G: Digital control as source of chaotic behaviour. International Journal of Bifurcation and Chaos, Applied Sciences and Engineering, 20(5): 1365-1378 (2010)
3. Dombóvári Z, Yusuf A & Stépán G: The Effect of Serration on Mechanics and Stability of Milling Cutters. International Journal of Machine Tools & Manufacture, 50(6): 511-520 (doi:10.1016/j.ijmachtools.2010.03.006) (2010)
4. Insperger T, Kovács LL, Galambos P and Stépán G: Increasing the accuracy of digital force control process using the act-and-wait concept. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, 15(2): 291-298 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	6	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	32		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :	32		
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban magyarul:	2	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban magyarul:	0	idegen nyelven:	5
Ebből impaktfakt. publ, térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	4
Könyv ⁸ magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹ magyarul:	1	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	7,5	Összes független hivatkozás száma:	23
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	23		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :	22		
	posztterek száma:	0	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :	9		
Témavezetések száma: TDK munka:	10	Diplomamunka (BSc):	11
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	24,4	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	456,4 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	3,7	MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt	
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			3
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2,7 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	450 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

BME IRÁNYÍTÁSTECHNIKAI KUTATÓCSOPORT

Keviczky László, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2. Q/B
telefon: 1-463 2870; fax: 1-463 2871
e-mail: keviczky@sztaki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A korábbi tudományos eredmények kiterjesztése több bemenetű és kimenetű lineáris, valamint egyre bonyolultabb nemlineáris rendszerek modellezésére és irányítására.

A statisztikai, modellezési, felismerési és adatbányászati területeken az egyik legnehezebb, de az ipari alkalmazások szempontjából különleges jelentőségű terület kiterjesztése olyan esetre, amikor is valamennyi adat-változóról feltételezzük, hogy mérési zajokkal terhelt.

Strukturálisan további komplexitás növekedést jelentő verbális etológiai modellek matematikai leírása, és robotok irányítása etológiai indíttatású modellek alapján.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A több bemenetű és kimenetű (*MIMO*) lineáris, állandó paraméterű (*LTI*: *Linear Time Invariant*) folyamatok osztályára kidolgozták az eddig ismert bal és jobboldali mátrix tört leírások (*MFD*: *Matrix Fraction Description*) alapján alkalmazható Youla- és KB-paraméterezésű szabályozók tervezési algoritmusait. Megadták a baloldali mátrix tört leírás (left *MFD*) azon alakját, amelynek felhasználásával adaptív szabályozókhoz rekurzív tanuló identifikációs módszerek alkalmazhatóak.

A Minnesotai Egyetem (University of Minnesota) Aerospace Department-jével együttműködve embernélküli (*UAV*: *Unmanned Aerial Vehicle*) kis robotrepülőgépek navigációjához és irányításához alapvető módszereket dolgoztak ki. A cél az, hogy az *UAV* teljes működési tartományára használható orientáció becslési módszert lehessen alkalmazni. Mivel a működési tartomány a felszállástól a pályakövetésen át a leszállásig több fázist tartalmaz, lényegében egy hibrid állapot – és paraméter becslési feladatot kell megoldani. Erre a problémára a *UAV* dinamikát kvaternio – állapot egyenlettel leíró model alapján *EKF* (*Extended Kalman Filter*) kidolgozására került sor. A tesztelést *HIL* (*Hardware-In-the-Loop* környezetben elvégezve már az eredmények bemutatására is sor került.

A fenti és hasonló igen összetett rendszerekben fontos a geometriai hibadetektáló és diagnosztikai szűrő tervezése. A geometriai alapú *FDI* (*Fault Detection and Isolation*) szűrőtervezés eredményeinek felhasználása olyan esetekben is lehetséges, amikor a tervezés alapjául szolgáló rendszer modellje bizonytalanságot (l. elhanyagolt dinamika) tartalmaz. Feltéve hogy van egy *FDI* szűrő a névleges modellre, ekkor a tervezési feladat egy robusztus Hinf – értelemben vett model illesztési feladatként írható fel. A megoldásra ajánlott módszer egy utasszállító repülőgép hibadiagnosztikájára is alkalmazásra került.

A polgári alkalmazások szempontjából nagy jelentőségű, hogy az előző feladatok kisköltségű *CAN* (*Controller Area Network*) hálózati architektúrák mellett is megvalósíthatóak-e. Egy kétmotoros *UAV* irányításában alkalmazott *CAN* hálózati architektúrát elemezve megvizsgálták, hogy olcsó elemekből milyen megbízhatóságú rendszer hozható létre. A javasolt architektúrákhoz elvégezték a megbízhatósági analízisben ismert *FMEA* (*Failure Mode and Effect Analysis*) és *MTBF*-en (*Mean Time Between Failure*) alapuló elemzéseket.

A jelenlegi megoldásokban a járművek fedélzeti irányítási rendszerei egymástól függetlenül működnek és jogos kérdés hogy magasabb szintű koordinatív irányítás miben tudja javítani a menet dinamikai tulajdonságokat. A pályakövetés vizsgálatával az integrált irányítás úgy is megoldható, hogy az az úttartást, a bőlintó és orsózó stabilitást is garantálja. Az *LPV* (Linear Parameter Varying) modellezési paradigmára építve egy kapcsolási stratégiát javasoltak a rekonfigurálható irányítás (kormányzás, fékezés, aktív felfüggesztés, stb.) megvalósításához.

Az elmúlt évtizedben az irányításelmélet és rendszeridentifikáció eszköztára egy rendkívül hatékony eszközzel, a szemidefinit programozással (*SDP*) bővült. Ennek speciális esete lineáris mátrix egyenlőtlenségeket (*LMI*) használ. Az *LMI*-k használata az irányítástechnikában intenzíven kutatott terület. Ezen technikákkal számos irányításelméleti problémára, stabilitási, analitikus és tervezési kérdésekre kaphatunk a robusztussági megfontolásokat is figyelembevevő elméletileg is érdekes megoldást. A kutatás keretében vizsgálták, hogy az *LMI* technikák hogyan használhatók a rendszeridentifikáció területén, hogyan lehet olyan becslési módszereket kidolgozni, amelyek eredményeként adódó modell az irányítási problémák kiinduló pontja lehet.

A predikciós irányítási algoritmusok egyre inkább alkalmazást nyernek az ipari gyakorlatban. A lineáris rendszerek predikciós irányítására elsősorban lassúbb folyamatok irányítására hatékony algoritmusok állnak rendelkezésre. Vizsgálták az algoritmusok olyan paraméterezését, amelyekkel gyorsabb működés érhető el. Mivel a valós folyamatok rendszerint tartalmazznak nemlinearitásokat, ennek figyelembe vételével javítható a szabályozás minősége. Nemlineáris rendszerek irányítására parametrikus kvadratikus Volterra modellen alapuló predikciós algoritmust dolgoztak ki.

A nemlineáris folyamatrendszerek modellezése és irányítása területén elért elméleti eredményekre támaszkodva maximális Lyapunov függvényeket felhasználva numerikus közelítő módszert dolgoztak ki hibrid nemlineáris rendszerek stabilitási tartományának meghatározására. A Paksi Atomerőmű primerkörében található nyomáskiegyenlítő tartály egyszerűsített dinamikus modelljét felhasználva, megbecsülték a modell valós fizikai tartalommal bíró paramétereit, majd dinamikus inverzió alapuló szabályozót terveztek. A szabályozót már az erőmű mind a négy blokkján megvalósították, és ennek köszönhetően az erőmű hasznos villamos teljesítményét 2 %-al sikerült növelni.

Mindazon nemlineáris folyamatokhoz, amelyek munkapontjában a lineáris közelítés Lyapunov stabilitása teljesül, megmutatták a robusztusság és minőség dialektikus összefüggését. A folyamat paramétereinek függvényében a Nyquist stabilitási mérték és a zárt rendszer sávszélessége került vizsgálatra.

A nemlineáris térvektor moduláció kisfrekvenciás tartományában kapott eddig ismeretlen mérési eredményeket elméleti megfontolásokon alapuló számítógépes szimulációval értelmezték.

A komplex, nagyméretű folyamatrendszerek diszkrét dinamikus modellezésére használatos színezett Petri háló modellek eszköztárát felhasználva megvizsgálták az ilyen rendszerekben fellépő meghibásodások detektálhatóságát és diagnosztizálhatóságát, valamint színezett Petri háló formájú diagnoszereket terveztek ezen meghibásodások on-line diagnosztikájára. A kidolgozott eszközöket és módszereket folyamatos és félfolyamatos vegyipari technológiákra tervezik alkalmazni egy nemzetközi, ausztrál-magyar kutatási együttműködés keretében.

Új eljárást dolgoztak ki mechatronikai rendszerek számára a dinamikus surlódási jelenségek hőmérsékletfüggésének modellezésére állapotbecslési technikával, amely robusztus surlódás kompenzáció alapját képezi. Az elmélet helyességét szimulációval demonstrálták.

Újszerű geometriai mértékeken és képjellemzőkön alapuló mozgás sztereó-elvű módszert dolgoztak ki robotikai alkalmazásokhoz.

Elkészült az első olyan robot, amelyik képes kötődni a gazdájához. A részletes tesztek 2011-ben várhatók.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Társadalmi hasznúnak és kiemelkedőnek tekinthető a szabályozástechnika tárgy oktatási színvonalának emelése a BME Villamosmérnöki és Informatika Karának Informatikai szakán. A tárgyat a 3. évfolyamon több mint 350 hallgató veszi fel. A tárgyhoz új elméleti és gyakorlati jegyzet készült 2006-ban, amelynek két javított kiadása volt 2007-ben és 2009-ben. A jegyzet alapján történik az oktatás a SZE-n és DE-n is. A tapasztalatokról 2010-ben IEEE nemzetközi konferencián hangzott el beszámoló.

Előadásokat tartottak a „Magyar Tudomány Ünnepe” a „Diákok az Akadémián” előadás sorozat keretében. Az előadás címe „MOGI Robi, a hűséges társ”.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport vezetője az EUCA (European Union Control Association) elnöke. A csoport egyik akadémikus tagja a European Power Electronics and Motion Control Council elnöke. A csoport minden tagja számos nemzetközi szervezet bizottságaiban, tudományos folyóiratok szerkesztőségi bizottságaiban dolgozik. Ezek feltüntetésére itt nincs hely és mód.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

K 062836 ny. számú OTKA pályázat. Címe: „Telemanipuláció intelligens térben”
EGT (Európai Gazdasági Térség)/Norvég Finanszírozási Mechanizmusok. Pályázat címe:
„Új, környezetbarát és versenyképes robottechnológiák magyar-norvég kutatásalapú innovációja célcsoportok számára (HUNOROB)” Ref.No: HU0045/NA/2006-2/ÖP-9.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Keviczky L, Bányász Cs: MIMO controller design for stable multivariable processes. (Invited plenary paper.) 17. Int Conf. on Systems Science, Wroclaw, PL. (2010)
2. Gruber JK, Bordons C, Bars R and Haber R: Nonlinear predictive control of smooth nonlinear systems based on Volterra models. Application to a pilot plant. Int. J. of Robust and Nonlinear Control, 20(16): 1817-1835 (2010)
3. Szabó Z, Szederkényi G, Gáspár P, Varga I, Hangos KM and Bokor J: Identification and dynamic inversion-based control of a pressurizer at the Paks NPP. Control Engineering Practice, 18(5):554-565 (2010)
4. Márton L and Lantos B: Control of robotic systems with unknown friction and payload, IEEE Trans. Control Systems Technology, 99: (2010)
5. Stumpf P, Varga Z, Sepsi T D, Jordan R K and Nagy I: Ultrahigh speed induction machine overheated by subharmonics of PWM inverter. IECON 2010, Glendale, AZ, U.S.A., 1748-1753 (2010)
6. Sziebig, G, Takarics B, Korondi P: Control of an embedded system via internet. IEEE Trans. Industrial Electronics, 57(10): 3324-3333 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Irányítástechnikai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1,5	Ebből kutató ² :	0,5
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			0
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			37
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			37
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
			8
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:
			4
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven:
			1
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven:
			1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	12,71	Összes független hivatkozás száma:	267
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	269		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			0
	posztterek száma:		0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	30	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			9
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	6	PhD:	6
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		15,0	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

BME KONDENZÁLT ANYAGOK FIZIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Jánossy András, az MTA rendes tagja
1111 Budapest Budafoki út 8. 1. lh. 1. em.
telefon: 1- 463 1391; fax: 1- 463 3819
e-mail: atj@szfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatás elsősorban alapkutatás jellegű és 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 és az EU 7. Keretprogram *Információ KommunikációsTechnológiák (ICT)* témacsoportéhoz tartozik, továbbá kapcsolódik az “alapú kollektív szociális viselkedés hasznosítása”projekthez.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A nanoméretű objektumokban az elektronok terjedésekor a spin-memória megőrizhető, és sok folyamatban meghatározóvá válnak a spin-függő kvantumeffektusok. Ennek köszönhetően lehetővé válik, hogy az elektron spinjét információ közvetítésére lehessen felhasználni és az aritmetikai műveleteket kvantummechanikai alapokon lehessen végezni. A jövő kvantumszámítógépének alapegységét jelentő q-bit forrása lehet a szupravezető Cooper-párok ellentétes spinű elektronjainak összefonódott állapota. A kutatócsoport tagjai – nemzetközi együttműködésben – komoly eredményeket értek le felhasadó Cooper-pár elektronjainak kísérleti azonosításában.

A kutatócsoportban tanulmányozták a szupravezető-fém határátmeneten lezajló fordított folyamatot is, a szupravezető Cooper-párok kialakulásának mechanizmusát. Alacsony hőmérsékleti kísérleteikben egy szupravezető túvel kialakított kontaktus méretét a nanométeres tartományban változtatták, és megmutatták, hogy a felület növelésével a fémes oldalon fellépő fáziskoherens visszaszóródás jelensége fokozatosan Josephson-effektussá alakul át. Értelmezésük szerint a koherens térfogat növekedésével a fémes oldalon proximity-szupravezetés jön létre, és a többszöri visszaverődéstől származó korábbi ún. „koherencia-csúcsot” a Cooper-párok alagutazása váltja fel.

A vezetési elektronok spin állapotának meghatározása komoly kihívás, a tökéletesen polarizált spin-áramot szállító mágneses fémek alapvető szerepet játszanak a spintronikai alkalmazásokban. A kutatócsoportban végzett magneto-optikai kísérletek spin-polarizált sávszerkezetek felkutatására irányultak. A mágneses cirkuláris kettőtörés spektroszkópia

méréstechnika infravörös tartományra történő kiterjesztésével kimutatták, hogy a szobahőmérsékleten ferromágneses CuCr_2Se_4 vezetési sávja teljesen spin-polarizált.

A nanorendszererek transzporttulajdonságainak megértése a mezoszkopikus fizika talán legnagyobb elméleti feladata. Iteratív perturbációelmélet segítségével tanulmányozták a szinglet-triplet átmenetet laterális és függőleges kvantum dotokban, amelyeket a nem-egyensúlyi, kétszintes Anderson modellel írtak le. Meglepetésre a perturbációelmélet viszonylag erős kölcsönhatásokig érvényes marad és a kísérleti eredményeket jól leírja, beleértve a differenciális vezetésben jelentkező „dip”-et, vagy az átmenetnél a lineáris vezetőképességben jelentkező maximumot.

Tanulmányozták az egyensúlyi és nem-egyensúlyi frekvenciafüggő spináram zaját és a kvantum doton keresztüli spin vezetőképességet a lokális momentum tartományban. A spináram korrelációk a töltésáramtól lényegesen eltérően viselkednek: a Kondo-skála alatt az egyensúlyi spináram-korrelációk csekély mértékűek, és egy univerzális skálafüggvénnyel jellemezhetők. Magasabb hőmérsékleten alacsony frekvenciás anomáliák lépnek fel, amelyek a teljes spinmegmaradással kapcsolatosak.

A szemcsés anyagok kvázisztatikus reológiáját vizsgálták, ezen belül azt a kérdést, hogy milyen mechanizmus alakítja ki a deformációs mezőt. Tervezték egy nagyon egyszerű nyírási geometriát, ami ideális az alapprobléma megjelenítésére és vizsgálatára. Bemutatták, hogy a szokásos feszültség - deformációs ráta relációkkal nem értelmezhető a kvázisztatikus eset. Javasoltak egy alternatív megközelítést, ahol a lokális deformáció generálja a környező anyag deformációját. Az ezen alapuló kontinuum modell analitikusan kezelhető, és összhangban áll az egyszerű tesztszisztemen végzett számítógépes szimulációkkal (arXiv:1009.3878).

A hálózatok kutatása a sztatikus, topológiai vizsgálatoktól egyre inkább a dinamikai kérdések, mint terjedési jelenségek, vagy – szociális, illetve gazdasági hálózatok esetében – az emberi viselkedés hatása felé fordul. Míg a kommunikációs hálózatok általában „kis világok”, vagyis a geodéziai távolság két pont között kicsiny, a terjedés általában meglepően lassú. Információ terjedését tanulmányozták kommunikációs hálózatokon empirikus adatok és az ún. SI terjedési modell segítségével. Alkalmass referenciarendszerek bevezetésével meg tudták különböztetni a különböző lassító hatásokat. Megállapították, hogy a terjedés alacsony sebessége főképpen a topológia és az él erőssége kapcsolatának, valamint a kommunikáló egyének nagyon inhomogén, „bursty” aktivitásának a következménye (arXiv:1006.2125).

A hálózatelméleti kutatások elsősorban a társadalom és az infokommunikációs technológia kölcsönhatására irányulnak: vizsgálják, hogyan változik a társadalom az új technológia következtében és milyen igényekkel lép fel a társadalom a technológia felé.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Ezen a területen a kutatócsoport keretein belül közvetlenül nem folytattak tevékenységet. Közvetetten az oktatásban való részvétel is a társadalommal való párbeszéd része. Kutatóink részt vettek a BME ilyen irányú munkájában, például Nyílt Nap, utánpótlás nevelés. A kutatócsoport szolgálja a társadalmi mobilitást is: fiatal kutatók külföldi munkájuk után a kutató csoporthoz csatlakoztak, illetve mások a végzett tudományos munkát befejezve a gazdaság egyéb területein vállaltak munkát.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatómunkát nemzetközi együttműködések keretében végzik. A *kísérleti szilárdtest-fizikában* fontos együttműködést alakítottak ki Y. Tokura (University of Tokyo, Japan), valamint C. Schönemberger (University of Basel, Svájc) világszerte ismert kutatócsoportjaival. Az elméleti kutatások szoros nemzetközi együttműködések keretében zajlanak. Főbb partnereink: Orsay, Paris (F), Aalto Univ. (FIN), Northwestern Univ. (USA), Univ. Karlsruhe (D).

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A 2010-ben elnyert pályázatok közül kiemelendő a „Cooper Pairs as a source of entanglement” című Európai Unió projekt, amit az European Research Council 1 496 000 EUR összeggel támogat öt éves futamidővel. Ebben az évben indult a „Spin injektálás, detektálás és manipulálás nanoeszközökben” CNK80991 nyilvántartási számú OTKA projekt is, 137 M Ft-os 3 évre vonatkozó támogatással. Mindkét pályázat szorosan kapcsolódik a kutatócsoport nanoelektronikai kutatásaihoz.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Geresdi A, Halbritter A, Mihály G: Transition from coherent mesoscopic single particle transport to proximity Josephson-current. Phys. Rev. B 82: 212501 (2010)
2. Demkó L, Kézsmarki I, Csontos M, Bordács S Mihály G: Improved thermal relaxation method for the simultaneous measurement of the specific heat and thermal conductivity. European Physical Journal B 74: 27 (2010)
3. Hofstetter L, Geresdi A, Aagesen M, Nygard J, Schönemberger C, Csonka S: Ferromagnetic Proximity Effect in a Ferromagnet-Quantum-Dot-Superconductor Device. Phys. Rev. Lett., 104: 246804 (2010)
4. Bordacs S, Kézsmarki I, Ohgushi K, Tokura Y: Experimental band structure of the nearly half-metallic CuCr_2Se_4 : an optical and magneto-optical study. New Journal of Physics, 12: 05339 (2010)
5. Antal A, Jánosy A, Forró L, Vertelman EJM, van Koningsbruggen PJ, van Loosdrecht PHM: Origin of the ESR spectrum in the Prussian blue analog $\text{RbMn}[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ center dot H_2O . Phys. Rev. B 82: 014422 (2010)
6. Zilly M, Ujsághy O, Wolf DE: Conductance of DNA molecules: Effects of decoherence and bonding. Physical Review B 82: 125125 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	10	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			16
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 14
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 14
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	62,15	Összes független hivatkozás száma:	291
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	329		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			6
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			14
Témavezetések száma: TDK munka:	7	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		34,1	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	152,8
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		40,8	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	54,0
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:			0
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	58,0
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0

BME MŰSZAKI ANALITIKAI KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Horvai György, az MTA levelező tagja
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.
telefon: 1-463 4056; fax: 1-463 3408
e-mail: <http://aak.bme.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése
Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások
Határfelületi jelenségek számítógépes modellezése

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése

Gazda-vendég rendszerek szenzorok előállításához: Optikai szenzorok fejlesztése céljából előállított originális, fluoreszcens azakoronaéter alapú szenzormolekuláikról megállapították, hogy az akridinon egységet és a koronaéter gyűrűben izobutilsoportokat tartalmazó ligandum kitüntetett szelektivitást mutat a Cu^{2+} ionra, míg az utóbbi *N*-metil analogonja nagy szelektivitással bír Cu^{2+} és Pb^{2+} ionokra. [1]

Molekuláris lenyomatú polimerek (MIP-ek) előállítása, jellemzése: Homodiszperz MIP részecskék előállítására különféle, nagy viszkozitású oldószereket használtak, köztük ionos folyadékokat is. Elsőként sikerült MIP mikroszemcséket in situ immobilizálniuk membránba. A membrán alkalmasnak bizonyult a templátmolekula szelektív megkötésére és alkalmas lehet különböző célvegyületek szelektív kinyerésére analitikai mintákból.

Felületi plazmon rezonancia (SPR) chipeken fotolitográfias eljárással felületi molekuláris lenyomatú PEDOT/PSS mikrosávokat alakítottak ki avidin molekuláris felismerésére. Az imprintelt mikrostruktúra erősen kötötte az avidint ($K_d=125\text{nM}$), és az eddig leírt fehérje MIP-ek közül az egyik legszelektívebbnek bizonyult (2011-ben megjelenik az Adv. Funct. Mat.-ban).

Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások

Új diagnosztikai mérési módszerek fehérjékre aptamerekkel: Növényi vírus burokfehérjére specifikus aptamereket szelektáltak és ezekkel SPR szenzort készítettek vírusok szelektív detektálására [2]. Az előbbi aptamerek segítségével a célfehérjék mind western blot-on, mind pedig dot blot-on is kimutathatóvá váltak. A hagyományos szendvics ELISA eljárás detektáló ellenanyagát aptamerrel helyettesítették, és az ily módon összeállított Enzyme Linked Oligonucleotide Assay (ELONA) módszer érzékenysége többszöröse az ELISA-nak. Az ELONA továbbfejlesztése során az ELISA minkét ellenanyagát aptamerrel váltották ki, így egy teljesen új mérési eljárást az ún. DOS-ELONA-t (Double Oligonucleotide Sandwich) dolgoztak ki. [3]

A szívinfarktust jelző troponin fehérje kódoló régióját cDNS könyvtárból amplifikálták, majd in vitro transzlációra alkalmas vektorba inzertálták. A létrehozott vektor konstrukció alkalmazásával a troponint in vitro transzlációval előállították, és affinitás kromatográfiával tisztították. Az ily módon nyert fehérjére aptamert szelektáltak, melynek funkcionalitását jelenleg vizsgálják.

Ionoforokkal módosított nanopórusok: A szilárdtest nanopórusok szelektív ion-felismerésre való alkalmazására még nem volt példa. A biológiai csatornafehérjék szelektivitását imitáló szerkezet szintetikus kémiai úton történő megvalósítása szilárdtest nanopórusokban szinte lehetetlen. Ezért a szelektív iontranszport biztosítására kész ionofort valamint ioncserélőt és hidrofobicitást biztosító komponenseket is immobilizáltak 6 mikrométer hosszúságú és kb. 4

nm átmérőjű arany nanopórusok belső falára. A ditiolán ionofor szelektivitását és a monomolekuláris önrendeződő rétegek kialakulását Au nanorészecskék módosításán keresztül bizonyították [4]. Sikeresült nanomólos kimutatási határral és kiváló szelektivitással rendelkező potenciometriás Ag^+ szenzort kifejleszteni. Ennek előnye a hagyományos elektródokkal szemben a hosszú élettartam és robusztusság valamint, hogy nem érzékeny lipofil komponensek jelenlétére és elvileg nem vizes közegben is alkalmazható. (Meghívott előadás a Pittcon 2010 konferencián, TDK dolgozatra BME rektori különdíj, közlemény elbírálás alatt).

Integrált nanopórus alapú érzékelők előállítás: Szilícium chipen előállított egyedi nanopórus érzékelőkkel nanorészecske számlálási modell kísérleteket végeztek. Ezek alapján új chip kialakítást terveztek meg, melynek gyártása folyamatban van. Emellett mikrofluidikai rendszer kialakítását kezdték el a Micronit mikrofluidikai céggel együttműködésben a nanopórusos érzékelők teljes fluidikai integrálása céljából. (Biosensor és EMRS konferenciákon előadás, közlemény elfogadva az Angew Chem Int Ed-ben).

Potenciometriás alapérzékelők fejlesztése: A nanopórus ionszelektív elektródok fejlesztésének elősegítésére új módszert dolgoztak ki az ionofor és ionofor-ion komplex diffúziós állandójának meghatározására, illetve szisztematikus vizsgálatot végeztek az általánosan használt membránösszetételek vízfelvételének meghatározására is [5]. Új PANI nanorészecskéken alapuló szilárd belső elvezetést dolgoztak ki nagy stabilitású potenciometriás Ca ionszelektív elektródokhoz. [6]

Határfelületi jelenségek számítógépes modellezése

Másodlagos kölcsönhatások vizsgálata fluid határfelületeken: Az általuk korábban kifejlesztett ITIM módszer segítségével tiszta DMSO, DMSO-víz elegyek, illetve vizet csak nyomokban tartalmazó víz-metanol elegyek folyadék/gőz határfelületét, illetve víz diklóretánnal alkotott folyadék/folyadék határfelületét vizsgálták. DMSO-víz elegyek felületén a DMSO molekulák adszorbeálódnak a felületen, de ez az adszorpció csak az első molekuláris rétegre terjed ki. A DMSO molekulák a felületen, hasonlóan a tömbfázisbeli elrendeződésükhöz, fej-láb állású dipól-dipól kölcsönhatással összekapcsolódó láncokba rendeződnek. [7, 8]

Megállapították, hogy víz és apoláros fluid fázisok határán a felület közelségének hatása a vizes fázis tulajdonságaira csak a felület alatti első molekuláris rétegre terjed ki. Az apoláros fázis dielektromos állandójának növekedésével (i) a vízmolekulák felületi rétege egyre diffúzabbá, szélesebbé válik, és ezzel egyidejűleg (ii) a két fázis felszínén található molekulák egyre szorosabban illeszkednek egymáshoz, azaz maga a határfelületi réteg egyre vékonyodik. [9]

A víz-benzol rendszerben - magas hőmérsékleteken és nyomásokon – azt találták, hogy a vízmolekulák felületi rétegének perkoláló két dimenziós, hidrogénkötéses hálójá jóval (200-400 K-nel) az elegyedési hőmérséklet alatt szétesik.[10]

A valódi határfelületek vizsgálatára alkalmas módszerek összehasonlító vizsgálata alapján az általuk kifejlesztett ITIM módszer kiváló kompromisszumot jelent a pontosság és a számításigény között: míg a Tarazona és munkatársai által kifejlesztett, egzaktan tekinthető ISM módszernél két nagyságrenddel gyorsabb, addig a többi, nagyjából hasonló számításigényű közelítő módszernél lényegesen pontosabb. [11,12]

Másodlagos kölcsönhatások vizsgálata szilárd határfelületeken: Benzaldehyd jégen történő adszorpciójára végzett számításaik igen jó egyezést mutattak az egyidejűleg végzett adszorpciós izoterma és adszorpcióhő mérésekkel. [13] Oxálsav adszorpciójának számítása során sikerült értelmezni azt a kísérleti tényt, hogy hevítés hatására az oxálsavval borított jégfelszín alól előbb távoznak vízmolekulák, minthogy az adszorpciós réteg megbomlana. A jelenség mögött az adszorbeált oxálsav molekulák közötti rendkívül erős laterális kölcsönhatások állnak [14]. Víz kormon történő adszorpciójához kifejlesztettek egy új, kémiaiilag stabil korom modellt, melynek segítségével magyarázni tudták a kísérleti

tapasztalatokat [15]. Megállapították, hogy hidrofil önszerveződő monorétegeken az adszorpció fő hajtóereje az új víz-víz hidrogénkötések kialakításának lehetősége. A stabil adszorpciós réteg ez esetben 2-5 molekuláris réteg vizet tartalmaz. [16]

Másodlagos kölcsönhatások vizsgálata polimer adszorpciója során: Vizsgálták tiszta polietilén-oxid (PEO) adszorpciós rétegét szabad vízfelszínen. Eredményeik azt mutatták, hogy a PEO molekula monomer egységeinek csak kevesebb mint 20%-val kapcsolódik közvetlenül a felületre, míg a vizes tömbfázisba hosszú, a gőzfázisba pedig rövid, 1-2 monomer egység hosszú hurkokkal merül bele. [17]

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A Magyar Kémikusok Lapjában a kutatócsoport vezetője interjút adott.

A kutatócsoport intenzíven foglalkozik a magyar társadalmat aktuálisan foglalkoztató problémával, az orvosi diagnosztikai eljárások olcsóbbá tételével (ld. előzőek).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A magyar és külföldi tudományos akadémiák közötti kétoldalú együttműködés

- Magyar-Észt (1 közlemény)
- Magyar-francia (3 közlemény)

Marie Curie projekt 7 európai kutatóhellyel és három céggel

Kutatási együttműködések más egyetemekkel

- Abo Akademi University, Finnország (vendégkutatók fogadása)
- Memphis University, USA (1 közlemény)

Oktatás egyetemeken: a csoport minden tagja aktívan oktat a BME-n

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A valódi fluid-fluid határfelület tulajdonságainak számítása számítógépes szimulációval (OTKA)

Chip architectures for diagnostics (ENIAC EU) (szerződéskötés alatt)

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tóth K: Tetrahedron, 66: 350-358 (2010)
2. Gyurcsányi RE, Mészáros T: Analyst, 135: 918–926 (2010)
3. Gyurcsányi RE, Mészáros T: FASEB J., 24: 4187-4195 (2010)
4. Gyurcsányi RE: Chem. Commun., 46: 607–609 (2010)
5. Gyurcsányi RE: J. Electroanal. Chem., 638: 254–261 (2010)
6. Gyurcsányi RE, Szűcs J: Anal. Chem., 82: 9425–9432 (2010)
7. Jedlovszky P, Horvai Gy: J. Chem. Phys., 132: 134701 (2010)
8. Jedlovszky P, Horvai Gy: J. Phys. Chem., C 114: 12207 (2010)
9. Jedlovszky P, Horvai Gy: J. Phys. Cond. Matt., 22: 284112 (2010)
10. Jedlovszky P, Horvai Gy: J. Phys. Chem., C 114: 21681 (2010)
11. Jedlovszky P: J. Phys. Chem., C 114: 11169 (2010)
12. Jedlovszky P: J. Phys. Chem., C 114: 18656 (2010)
13. Jedlovszky P: Langmuir, 26: 9596 (2010)
14. Jedlovszky P: Chem. Phys. Chem., 11: 3971 (2010)
15. Jedlovszky P: J. Chem. Phys., 133: 144702 (2010)
16. Jedlovszky P: Phys. Chem. Chem. Phys., 12: 4604 (2010)
17. Jedlovszky P: J. Phys. Chem., B 114: 10995 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	4	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			26
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			26
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	2	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 20
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 18
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	77,0	Összes független hivatkozás száma:	473
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	680		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			7
		posztterek száma:	11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			8
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	11

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		18,6	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	26,1 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		26,1	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

BME SZERVES KÉMIAI TECHNOLÓGIA TANSZÉKI KUTATÓCSOPORT

Faigl Ferenc, az MTA doktora
1111 Budapest, Budafoki út 8.
telefon: 1-463 3652; fax: 1-463 3648
e-mail: ffaigl@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatócsoport tagjai, a munkatervnek megfelelően, négy főbb területen végeztek kutatómunkát:

- Új optikailag aktív vegyületek előállítása és tesztelése enantioszelektív reakciókban.
- Enantiomerek elválasztási módszereinek kutatása, rokon szerkezetű anyagok rezolválási lehetőségeinek vizsgálata.
- Poláris fémorganikus vegyületek regio- és sztereoszelektív reakcióinak kutatása.
- Nagy szelektivitású funkcionálizálási módszerek kutatása gyógyszeripari fontosságú vegyületek körében.

A kutatócsoport befogadó intézményével fennálló megállapodás szerint a kutatók feladata volt a tanszék oktatási munkájában történő részvétel előadások, laboratóriumi gyakorlatok vezetésével, BSc és MSc diplomamunkák, TDK dolgozatok készítőinek témavezetésével.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

- Több új TADDOL alapú királis katalizátort szintetizáltak, és kettőt ezek közül sikeresen alkalmaztak cianometil-foszfónátok és α -nitroetil-foszfónátok sztereoszelektív Michael-addíciójában. A módszerrel enantiomertiszta adduktokat állítottak elő, amelyek redukciójával α -és β -aminofoszfónátok kaphatók. Az atropizomériát mutató 1-arilpirrol származékok kutatása során új vegyületeket állítottak elő, többek között foszfán-származékot is szintetizáltak és izolálták ennek katalizátorként alkalmazható palládium komplexét.
- Glükopiranozid-alapú koronaéterek, mint fázistranszfer-katalizátorok alkalmazásakor jelentős aszimmetrikus indukciót figyeltek meg szubsztituált kalkonok epoxidációjában. A legjobb eredményeket (83–97% ee) a *para*-szubsztituált vegyületeknél érték el.
- Megoldották egy új, atropizomériát mutató dikarbonsav optikai izomerjeinek elválasztását és tudományos együttműködés keretében meghatározták az enantiomerek abszolút konfigurációját. Racém foszfolén-oxidok újszerű, koordinációs komplex képzésén keresztüli rezolválását valósították meg borkősav származékokkal. Megállapították, hogy a kalcium és/vagy magnézium központi fématomot tartalmazó diasztereomer komplexek képzése széles körben alkalmazható foszfolén-oxidok rezolválására. A racém 1-fenil-1,2-dihidrofoszfinin-oxid rezolválását TADDOL alkalmazásával végezték. A tiszta enantiomerek alkalmasak lehetnek új, kétfogú királis P ligandumokat tartalmazó Pt-komplexek előállítására.
- A rokon molekulaszervezetű racém vegyületek és tiszta enantiomerek közötti királis felismerési folyamatok kutatásának eredményeit összegezve megállapították, hogy a racém vegyületre jellemző viselkedés határozza meg az rezolválás hatékonyságát. Racém *N*-acil-aminosavak rokon molekulaszervezetű bázisokkal végzett rezolválásainak vizsgálata azt mutatta, hogy a képződő diasztereomerek döntően kvázi racemátot (heterokirális), ritkábban kvázi konglomerátumot (homokirális) képeznek, és a diasztereomer típusát a racém vegyület szerkezete határozza meg. Rendszereztek a nem racém enantiomer keverékek elválasztási módszereit is, mely angol nyelvű összefoglaló közleményként (review) jelent meg.
- A 2,3-diszubsztituált-azetidinek előállítására egy éve kifejlesztett új, szintézis-módszer kutatását folytatva megállapították, hogy a *cisz*-2,3-diszubsztituált-oxiránokból kiinduló,

szuperbázist alkalmazó reakcióban minden esetben sztereoszelektíven a *transz*-azetidín származék képződik. A korábban kidolgozott új, sztereoszelektív oxetán előállítás mód szert sikerrel alkalmazták egy vérnyomáscsökkentő hatású gyógyszer hatóanyag intermedierjének szintézisében. Az 1-arilpirrol származékok brómozásával kapott vegyületek halogén/fém kicserélési reakcióival ugyancsak új atropizomereket állítottak elő.

- Benzonitril heterogén katalitikus redukcióját hordozós nemesfém-katalizátorokkal (Pd/C, Pt/C, Rh/C, Ru/C) vizsgálták és megállapították, hogy a primer aminra vonatkoztatott szelektivitás Pd/C katalizátor alkalmazásakor a legnagyobb (95%, más katalizátorokkal max. 70%). A szignifikáns szelektivitásbeli különbséget feltehetőleg a fémek eltérő koordinációs tulajdonságai okozzák. A 7-dezoxi-*transz*-dihidronarciclasin, egy jelentős citosztatikus hatással rendelkező fenantridon alkaloid sztereoszelektív totálszintézise során ciklusos, telített nitrovegyületek újszerű heterogén katalitikus hidrogénezését valósították meg.
- Tanulmányozták mikrohullámú (MW) és fázistranszfer körülmények között néhány foszfortartalmú CH-savas vegyület, így a tetrafenil-metilénbiszfoszfin-oxid és a dietil-1-cianometilfoszfonát alkilezési reakcióit. A gyűrűs foszfinsavak mikrohullámú körülmények között, alkoholokkal végzett direkt észterezéséhez szükséges 1-hidroxi-3-metilfoszfolán-oxid előállítását új, az eddig alkalmazott többlépéses szintézisnél sokkal környezetkímélőbb módon (zöld kémia), egylépéses hidrogénezési módszerrel oldották meg.
- Poláris fémorganikus reagensek alkalmazásával új, nagy szelektivitású és méretnövelhető szintézismódszereket dolgoztak ki gyógyszer hatóanyagok kulcsintermedierjeiként használható 5-helyettesített-ftalidok, valamint egy többszörösen helyettesített biciklo[4.2.0]okta-1,3,5-trién származék előállítására. Az utóbbi vegyület új előállításán alapuló gyógyszer hatóanyag szintézisről az érdekelt gyógyszergyár munkatársaival közös szabadalmi bejelentést tettek, a szintézis méretnövelése megkezdődött.
- Több új rezolválási módszert dolgoztak ki gyógyszeripari intermedierek enantiomerjeinek elválasztására. Ezekről szabadalmi bejelentések, illetve know-how készültek és két eljárásnak a kísérleti üzemi kipróbálása megkezdődött.
- A csoport prémiuméves kutatója aminoxiloxánokhoz kovalens módon kötött, illetve kötés nélkül pamutszövetre rávitt reaktív színezékek fotobomlási sebességét tanulmányozva megállapította, hogy az aminoxiloxánok a vizsgált rendszerben nagyon hatékony fotoszenzibilizátorok és a fakulás sebességét a hőkezelés ideje illetve hőmérséklete csak kis mértékben módosítja. Papíripari szennyvizek környezetbarát tisztítása érdekében a hagyományos élőiszapos eljárással előtisztított szennyvizet utókezelték *Chlorella Vulgaris Hamburgensis (CVH)* illetve *Balatonii Chlorella Vulgaris (BCV)* algákkal. Megállapították, hogy az utánkezelés hatására csökken a szennyvíz foszfor és nitrogén tartalma, illetve a kémiai oxigén igénye (KOI).

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

- A kutatócsoport tagjai 2010-ben is részt vettek a befogadó intézményben középiskolásoknak szervezett nyílt nap programjában a kutatólaboratóriumok bemutatásával.
- Emellett a kutatócsoport vezetőjének irányításával az élvezeti szerek kémiájának és biológiai hatásainak ismertetésére szerveztek előadás sorozatot, amit a BME összes karáról (építész, közgazdász, gépész, stb.) több mint 300 diák hallgatott végig.
- Az érintett betegcsoportok életminőségének javítását szolgálja a 2010-ben kidolgozott három új, szabadalomképes eljárás gyógyszer hatóanyagok és intermedierjeik előállítására. Az eljárások méretnövelése az ipari partnereknél megkezdődött. Az eljárások ipari alkalmazása a jelentős árbevételt hozhat a cégeknek és így az ottani munkahelyek megőrzéséhez is hozzájárulhat.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

- A csoport minden tagja szoros együttműködésben dolgozik a befogadó tanszék oktatóival és intenzíven részt vesznek az oktatómunkában. A szeptetmeghatározásokhoz szükséges spektroszkópiai háttérrel a BME Szervetlen és Analitikai Tanszékével és az MTA KK Szerkezeti Kémia Intézetével kialakított együttműködés biztosítja. 2010-ben a Chinoin (Sanofi-Aventis) ZRt-vel és a Richter Gedeon NyRt-vel kötött szerződéses kutatómunkákban vettek részt a csoport tagjai.
- A tárgyévben sikeresen folytatódott a CNR-MTA együttműködés kutatási programja.
- A kutatócsoport vezetője az EU COST D40 akció Management Committee magyar tagja, a liszaboni székhelyű Hovione gyógyszergyár és a BME VBK közötti együttműködés magyar koordinátora.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai témavezetőként és/vagy kutatóként három OTKA pályázat teljesítésében vettek részt. Emellett sikeresen oldottak meg négy ipari K+F szerződéshez kapcsolódó feladatot. A CNR firenzei intézetével (Dr. Mordini, A) a fémorganikus területen fennálló sikeres tudományos együttműködés folytatására 2010-ben újabb, három évre szóló bilaterális szerződést írt alá az MTA és a CNR.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Pham T S, Balázs L, Petneházy I, Jászay Zs: Enantioselective Michael addition of diethyl cyanomethyl phosphonate to chalcones using bifunctional cinchona derived organocatalysts: Synthesis of chiral precursors of α -substituted β -aminophosphonates. *Tetrahedron: Asymmetry*, 21: 346-351 (2010)
2. Makó A, Rapi Zs, Keglevich Gy, Szöllősy Á, Drahos L, Hegedűs L, Bakó P: Asymmetric epoxidation of substituted chalcones and chalcone analogues catalyzed by α -D-glucose- and α -D-mannose-based crown ethers. *Tetrahedron: Asymmetry*, 21: 919-925 (2010)
3. Faigl F, Fogassy E, Nógrádi M, Pálovics E, Schindler J: Separation of non-racemic mixtures of enantiomers: an essential part of optical resolution. *Org. Biomol. Chem.*, 8: 947-959 (2010)
4. Faigl F, Thurner A, Molnár B, Simig Gy, Volk B: Manufacturing Synthesis of 5-Substituted Phthalides *Organic Process Research & Development*, 14: 617-622 (2010)
5. Ujj V, Bagi P, Schindler J, Madarasz J, Fogassy E, Keglevich Gy: A Practical and Efficient Method for the Resolution of 3-Phospholene 1-oxides via Coordination Complex Formation. *Chirality*, 22: 699-705 (2010)
6. Pálovics E, Schindler J, Faigl F, Fogassy E: The influence of molecular structure and crystallization time on the efficiency of diastereoisomeric salt forming resolutions. *Tetrahedron:Asymmetry*, 21: 2429-2434 (2010)
7. Milen M, Grün A, Bálint E, Dancsó A, Keglevich Gy: A Study on the Solid-Liquid Phase Alkylation of N-Heterocycles; MW-Assisted Synthesis as an Environmentally Friendly Alternative. *Synthetic Communication*, 40: 2291-2301 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	5	Ebből kutató ² :	5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			24
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			0
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven: 16
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	34,06	Összes független hivatkozás száma:	202
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	285		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			2
		posztterek száma:	6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			7
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	18,6	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	
Teljes saját bevétel:	16,5	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		4
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	6,5	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:		0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		4
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	10	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:		0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		0 MFt

BME SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Tóth Bálint, az MTA doktora
1111 Budapest, Egry József u. 1.
telefon: 1-463 1101; fax: 1-463 1677
email: balint@math.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A beszámolási időszak a kutatócsoport tevékenységének tizenkettedik éve, egyben a harmadik pályázati ciklus negyedik éve. A kutatócsoportban PhD-vel rendelkező, illetve PhD védés előtt álló, a tudományos pályán komoly eredményeket elért, nemzetközileg is ismert kutatók dolgoznak, akik eredményeiket rangos nemzetközi fórumokon publikálják és adják elő.

2010-re a csoport összetétele valamelyest változott, így a pályázatban szereplő témák közül a korábbinál nagyobb hangsúlyt kapott a statisztikus fizika és az informatika szempontjából érdekes sztochasztikus – elsősorban gráfnövekedési és bolyongási – folyamatok vizsgálata. Emellett továbbra is hangsúlyosak a következő témák: Kölcsönható részecske-rendszerek aszimptotikus vizsgálata, Dinamikai rendszerek sztochasztikus viselkedése, valamint Információelmélet és matematikai statisztika. A beszámolóban – az elmúlt évek gyakorlatának megfelelően – kizárólag a kutatócsoport alkalmazottainak a témához közvetlenül kapcsolódó munkáiról adunk számot.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Ezen fejezet végén található egy közlemény-lista, ami nagyrészt a kutatócsoport közlésre már elfogadott, de 2010-ben még meg nem jelent közleményeit tartalmazza, kisebb részben kéziratokat. A csoport 2010. évi eredményeinek többségét ezek tartalmazzák, ezért a szöveg ezekre is hivatkozik (a 2010-ben megjelent, az V. fejezetben felsorolt munkák mellett).

Fizikában és informatikában releváns sztochasztikus folyamatok vizsgálata

A sűrű gráf-sorozatok Lovász és Szegedy által megalapozott elméletének egy lehetséges, multigráfokra való általánosítását dolgozták ki. [M2]

Ezen multigráf-limeszek időfejlődését vizsgálták egy olyan sztochasztikus modellben, ahol minden pillanatban egy egyenletesen választott véletlen él egy végpontja áthelyeződik, az új véletlen végpont kiválasztásánál pedig lineárisan nagyobb esélyt kapnak a nagyobb fokszerű csúcsok. (ú.n. „preferential attachment” típusú modell). A gráf-limesz időfejlődésére sikerült teljes leírást adnia következő értelemben: ha a sztochasztikus multigráf-folyamat kezdő-állapotainak egy, a fenti értelemben konvergens sorozatát tekintik, ennek a limesz-objektumnak a fejlődését teljesen leírták az idő megfelelő skálázása mellett, egészen a stacionárius állapotig. Fontos felfedezés, hogy a párhuzamos élek száma és a fokszerű csúcsok más időskálán fejlődnek, ezért a rendszer „öregszik”. [M4]

A gráf-növekedés limesz-objektumának globális tulajdonságait vizsgálták olyan fanövekedési modellben, ahol a meglévő fához minden lépésben egy új csúcs csatlakozik, szomszédot véletlenül választva a meglévő csúcsok közül, súlyozva a már meglévő szomszédok száma alapján. Ennek a „preferential attachment” választásnak a súlyfüggvénye azonban (ésszerű korlátok között) tetszőleges lehet. Ennek a növekvő fának a természetes limesz-objektuma egy véletlen mértékű végtelen fa leveleinek halmazán. A kutatócsoport megmutatta, hogy ennek a véletlen mértékűnek a Hausdorff- és pakolási dimenziója 1 valószínűséggel azonos és állandó, sőt, a mérték lokális dimenziója is ugyanennyi majdnem minden pontban (ezen mérték szerint). Ezen felül explicit formulát adtak a dimenzióra, mint a kapcsolódási szabály (vagyis a súlyfüggvény) függvényére. [M5]

Kidolgozták a „valódi”, avagy „rövidlátó” önelkerülő bolyongás csúcs-taszításon alapuló modelljének a folytonos idejű változatát 1 dimenzióban. Határeloszlás-tételt bizonyítottak a bolyongás lokális idejére, valamint lokális határeloszlás-tételt az elmozdulásra. [M6]

Párhuzamosan vizsgálták a „valódi”, avagy „rövidlátó” önelkerülő bolyongás és az öntaszító Brown-féle polimerek aszimptotikus viselkedését 3 és több dimenzióban. A két modellben (mindkettő sztochasztikus folyamat) hasonló hosszútávú memória-effektusok jelennek meg a trajektóriák öntaszító volta miatt, valamint közel azonos heuritikus (renorm-csoport) érveléseken alapuló sejtések vannak a diffúzív viselkedésre magas (legalább 3) dimenzióban. Az önelkerülő bolyongás esetén sikerült az ön-kölcsönhatási függvények egy széles osztályára diffúzív alsó és felső becslést adni, egy különösen érdekes kölcsönhatás-osztály esetén pedig teljes CHT-t az elmozdulás véges dimenziós marginálisaira. A Brown-féle polimerek esetén az ön-kölcsönhatásra tett lényeges feltételek nélkül sikerült teljes CHT-t bizonyítani. [M1]

Információelmélet és matematikai statisztika

Hosszú memóriájú folyamatok szekvenciális becslése során gyakran előfordul, hogy a folyamatot n ideig megfigyelve a következő értéket nem lehet konzisztens módon becsülni, legalábbis nem minden n -re. Ilyenkor időszakos becsléssel próbálkozhatunk, amikor is nem minden lépésben vállalkozunk becslésre, csak bizonyos megállási idők elérésekor, cserébe a becslés konzisztens lehet. A kutatócsoportnak ilyen időszakos becslést sikerült adni stacionárius, valós értékű Gauss-folyamatok esetén a következő megfigyelés (feltételes) várható értékére (az eddigi megfigyelések, mint feltétel mellett). [1]

Valós értékű, stacionárius és ergodikus folyamatok paraméter-mentes szekvenciális becslésére dolgoztak ki egy igen általános eljárást. A folyamatot n ideig megfigyelve megadnak egy becslést a következő megfigyelés (feltételes) várható értékére (feltéve az eddigi megfigyelteket), oly módon, hogy a hibák sorozata egy valószínűséggel L^p -beli, ha a folyamat maga is az, és $p > 1$. A megadott becslés ráadásul minden p -re egyszerre működik. Megmutatták továbbá, hogy $p=1$ esetén maga az integrálhatóság nem elegendő, de az „ $L \log_+ L$ ” feltétel igen. [M3]

Kölcsönható rendszerek aszimptotikája, Dinamikai rendszerek sztochasztikus viselkedése

A hővezetésnek egy fizikai modelljét vizsgálták, ami a Gaspard és Gilbert által 2006-ban bevezetett biliárd hővezetés-modell egy természetes továbbfejlesztése. Ebben a modellben a hővezetésért olyan részecskék felelnek, amelyek lényegében egy rács pontjaiban vannak, a rendszer geometriai elrendezése folytán helyhez kötöttek, de szomszédaikkal kölcsönhatva velük energiát cserélhetnek. A mozgás a Newton-törvények szerint történik, teljesen determinisztikus. Ennek a rendszernek a hővezetése két lépésben érthető meg: először tekintsük a dinamikai rendszerben a „gyenge kölcsönhatás határesetet”, amikor az energiát tároló részecskék közötti kölcsönhatás erőssége nullához tart, cserébe az időt megfelelően skálázzuk. Határesetben a részecskék pontos állapotát nem, csak az energiájukat tekintjük. A modell sajátosságai miatt ekkor az energiák (határ)folyamata *Markov* lesz, vagyis egy kölcsönható részecskerendszerhez jutunk. Ebben a kölcsönható részecskerendszerben azután a hidrodinamikai viselkedés sokkal könnyebben megérthető, mint az eredeti mechanikai modellben. A kutatócsoport egyelőre jól megalapozott sejtéseket állított fel a Markov folyamat generátorára, a hővezetési egyenlet alakjára, illetve a hővezetési együttható hőmérsékletfüggésére. Óriási értéke az eredménynek, hogy közvetlen kapcsolatot teremt a matematikai statisztikus fizika eme két – célkitűzéseiben rokon, de technikailag távoli – ága között. [2]

Egyéb: A csoport egy tagja 2010-ben védte meg PhD értekezését.

- [M1] Horváth I, Tóth B, Vető B: Diffusive limits for "true" (or myopic) self-avoiding random walks and self-repellent Brownian polymers in $d \geq 3$. Probab Theory Rel, to appear (2011)
- [M2] Kolossváry I, Ráth B: Multigraph limits and exchangeability. Acta Math. Hun., 130 (1-2): 1-34 (2011)
- [M3] Morvai G, Weiss B: Nonparametric Sequential Prediction for Stationary Processes. Ann Probab, to appear (2011)
- [M4] Ráth B, Szakács L: Time evolution of dense multigraph limits under edge-conservative preferential attachment dynamics (submitted)
- [M5] Rudas A, Tóth IP: Entropy and Hausdorff Dimension in Random Growing Trees (submitted)
- [M6] Tóth B, Vető B: Continuous time 'true' self-avoiding random walk on \mathbb{Z} ALEA, Lat. Am. J. Probab. Math. Stat., 8: 59–75 (2011)

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport vezetője élen jár matematikai eredményeknek a tudomány iránt érdeklődő laikus hallgatóság, illetve a matematika iránt érdeklődő tudós, de nem matematikus hallgatóság számára való közvetítésében. 2010-ben három ilyen jellegű kollokviumi előadást tartott széles nemzetközi közönség számára Bukarestben, Münchenben és Budapesten. Ezek egyike az MTA-n Stanislav Smirnov Fields-érmes matematikus munkásságának bemutatása a legszélesebb tudós (úgy reál, mint humán) közönség előtt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A csoport egy tagja 2010. szeptemberétől post-doc az ETH-n (Zürich), egy másik tagja 2010. augusztusig volt post-doc a Helsinki Egyetemen. Új kapcsolatok jöttek létre a heidelbergi és a tübingeni egyetemmel, míg a korábbi évek beszámolóiban említett más szakmai együttműködések tovább élnek. A kutatócsoport tagjai rendszeresen részt vesznek a BME-n az oktatásban, beleértve TDK és diploma témavezetést is. A kutatócsoport vezetője egy rangos nemzetközi tudományos folyóirat főszerkesztője, egynek pedig szerkesztője, így cikkek tömegéről dönt vagy készít elő döntést. Ez indokolja a beszámoló VI.6 fejezetében az „egyéb szakértői tevékenység” rovatban lévő hatalmas számot (250).

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport egy tagja post-doc állás-pályázatot nyert el az ETH-n (Zürich). A csoport vezetője egy össz-európai konzorcium tagjaként az az ESF kutatóhálózatok létrehozására kiírt pályázatán nyert a „Random Geometry of Large Interacting Systems and Statistical Physics” (RGLIS) 5-éves projekttel, amit az EU évi kb. 100000 EUR-val támogat. A kutatócsoport egy tagjának egyéves külföldi útja miatt le kellett mondania PD73609 jelű egyszemélyes OTKA pályázatáról, ő hazatérve a rokon témában futó K71693 projekthez csatlakozhatott, így ismét minden tag számára biztosított az utazás és vendégek hívásának lehetősége.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Molnár-Sáska G, Morvai G: Intermittent Estimation for Gaussian. Processes. IEEE Transactions on Information Theory, 56 (6): 2778-2782 (2010)
2. Pajor-Gyulai Zs, Szász D, Tóth IP: Billiard models and energy transfer. In: Exner P (ed) XVIth International Congress on Mathematical Physics. Singapore: World Scientific Publ. Inc., Singapore, 328-332 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Sztochasztika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	4	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	3
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :	3
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban magyarul:	0
idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban magyarul:	0
idegen nyelven:	1
Ebből impaktfakt. publ, térkép magyarul:	0
idegen nyelven:	1
Könyv ⁸ magyarul:	0
idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹ magyarul:	0
idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	2,36	Összes független hivatkozás száma:	43
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	64		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :	19
posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3
Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :	5
Témavezetések száma: TDK munka:	2
Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	0
PhD:	3

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	14,0	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:
		7,6 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		3
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	7,6	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:		0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:		0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		0 MFt

BME VÍZGAZDÁLKODÁSI KUTATÓCSOPORT

Somlyódy László, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.
telefon: 1-463 1530; fax: 1-463 3753
e-mail: somlyody@vkkt.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A fenntartható vízgazdálkodás területén a kutatócsoport 2010-ben a következő témakörökkel foglalkozott: (a) az EU Víz Keretirányelv hazai megvalósítása, (b) a hazai vízgazdálkodás stratégiai fontosságú feladatai, (c) vízmennyiségi-vízminőségi forgatókönyvek elemzése 2050-ig, (d) árvízi és belvízi kockázatok, (e) felszíni vizek eutrofizálódása, (f) az éghajlatváltozás hatása az ivóvízkészletekre, (g) a települési vízgazdálkodás K+F+I kérdései.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport szorosan együttműködik a BME Vízi Közmű és Környezetmérnöki Tanszékével, amelynek keretében működik.

Elkészült az ország *vízgyűjtő-gazdálkodási terve (VGT)*, amely a vizek állapotának javítását szolgáló intézkedéseket foglalja össze, az EU Víz Keretirányelvének (VKI) megfelelően. Az EU támogatású projekt keretében a tanszék 2010. évi feladata a terv állapotértékeléssel és intézkedésekkel foglalkozó részeinek összeállítása volt. A 2010. évi költségvetés alvállalkozók nélkül 12,4 millió Ft. Résztvevők: a kutatócsoport vezetője, 1 tagja és 1 támogató tag.

A VKI és a VGT alapdokumentumok, azonban önmagukban nem adnak megoldást számos stratégiai kérdésben. Az MTA Elnöksége által kezdeményezett stratégiai elemzések keretében elkészült *A hazai vízgazdálkodás: helyzetelemzés és stratégiai feladatok* című kötet. A vízminőségi és vízkészlet-gazdálkodási kérdések mellett elemzi az árvizek, a belvizek, az aszály és a területfejlesztés kapcsolatát, az ivóvízellátást, a szennyvízkezelést és a csapadékvíz elvezetést. Kiemelten foglalkozik az intézményi problémákkal. A kötet a jelenlegi helyzet SWOT elemzésére alapozva és a főbb hajtóerőket (VKI, éghajlatváltozás) figyelembe véve határozza meg a rövid, közép- és hosszú távú feladatokat. A munka saját forrásokból valósult meg, a kutatócsoport vezetőjének koordinálásában, az egyes témakörök kidolgozásában a munkacsoport egy tagja és három támogató tagja vett részt. A tanulmánykötet könyv formájában 2011. márciusában fog megjelenni.

A *WaterRisk projekt* (NKTH, TECH-08-02) célja döntéstámogató szoftver kifejlesztése a vízkészletek és szélsőségek hatásainak elemzésére. A hidrológiai modell fizikai alapú, térben és időben osztott paraméterű. Számítja a vízháztartás összetevőit, majd a felszíni és felszín alatti készleteket. A rendszer összekapcsolja a mederbeli lefolyás, a felszíni szétterülés és a talajvízmozgás hidraulikai modelljeit. A szoftver alkalmas arra, hogy az éghajlatban, a földhasználatban, a társadalmi preferenciákban bekövetkező változások és a tervezett intézkedések hatásait elemezze. A 2010. évi költségvetés alvállalkozók nélkül 17,5 millió Ft. A projekt irányítója a kutatócsoport támogató tagja, résztvevő a kutatócsoport 1 tagja.

Az Európai Unió által támogatott *SCENES projekt* célja, hogy Európa vízkészleteinek és igényeinek jövőbeli alakulására dolgozzon ki forgatókönyveket döntéshozó csoportok bevonásával. A tíz mintaterületek közül az egyik a Tisza-vízgyűjtő volt. 2010-ben a víz állapotokat jellemző indikátorok 2050-re várható változásának értékelése történt meg, modellszámítások alapján. A területre jellemző indikátorokat (árvízi veszély, öntözési vízhiány) összevetve a nagyléptékű WaterGap modellel, megállapítható, hogy az egyezés elfogadható, de az indikátorok finomítása javasolható. A 2010. évi költségvetés alvállalkozók nélkül 6,2 millió Ft. A projekt irányítója a kutatócsoport támogató tagja, a kidolgozásban a kutatócsoport 1 tagja vett részt.

A Balaton Keszthelyi-medencéjében automatikus *fitoplankton mérőállomás* működik, a globális limnológiai mérőhálózat (GLEON) részeként. A késleltetett fluoreszcencia alapján mért fény-fotoszintézis (PI) függvények és a napi oxigén termelés összehasonlításával rámutattak a két mérés közötti konverzió lehetőségére. Az OTKA projekt újabb eredménye a "bentikus visszatartás" hipotézise. A planktonikus és meroplanktonikus algák növekedésére kidolgozott egyszerű modellek segítségével értékelték az alga-populációk öfenntartásának feltételeit. A munka saját és tanszéki forrásokból (mintegy 2 millió Ft értékben) valósult meg. A kutatócsoport 1 tagja foglalkozott ezzel a kutatással, egy külső kutató segítségével.

A *Fertő-tó* esetleges vízpótlásának a vízminőségre gyakorolt hatásával foglalkozott a Bécsi Műszaki Egyetem megbízásából végrehajtott kutatás. Megállapítható, hogy a Rábából történő, a növekvő párolgást ellensúlyozó vízpótlás nem okozza a tó eutrofizálódását, sem szikes jellegének megváltozását. A projekt alvállalkozók nélküli költségvetése 2,4 millió Ft. A kutatásban egy támogató tag vett részt.

A Dél-kelet Európai Együttműködés (SEE) keretében megvalósuló *CC-WaterS projektben* 9 ország 20 mintaterületen vizsgálja az IPCC A1B éghajlati forgatókönyvének hatását az ivóvízellátás célú vízkészletek mennyiségére és minőségére. A Tanszék a Nyírség mintaterületét tanulmányozta. A vizsgálatok alapján az ivóvízkészleteket veszélyeztető vízminőségi tendenciák nem tapasztalhatók és nem várhatók. A vízháztartási és felszín alatti hidrodinamikai modellezés alapján megállapított megújuló készletek csak a területi vízvisszatartás növelése esetén képesek egyaránt kielégíteni az emberi és az ökológiai vízigényeket. Az ÖBKI-vel együttműködve, új módszerrel történt a felszín alatti vizektől függő ökoszisztémák vízigényének becslése. A kutatásban a kutatócsoport egy tagja vesz részt. A megbízás összege 1,15 millió forint.

Nemzeti Víztechnológiai Platform (NKTH – NTP/08) keretében 2010-ben elkészült a hosszú távú K+F+I stratégia Megvalósítási Terve, amely forgatókönyvek elemzése révén ajánlásokat fogalmaz meg a települési vízgazdálkodás hét területének jövőbeni fejlesztésére és K+F+I feladataira. A javaslatok kiterjednek a célokra, a költségekre, a várható eredményekre, a fejlesztésben részt vevőkre, a kockázatcsökkentési lehetőségekre, az erőforrás igényekre, a pályázati rendszer átalakításának igényeire és az ütemezésre. A 2010. évi költségvetés alvállalkozók nélkül 8,6 millió Ft. Résztvevők: a kutatócsoport vezetője és két támogató tagja.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A vízzel kapcsolatos kérdések (árvíz, belvíz, aszály, ivóvíz, víztől függő természeti értékek) iránt növekszik a társadalmi érdeklődés. Ennek megfelelően a vízgyűjtő-gazdálkodási tervet kiterjedt társadalmi egyeztetés után fogadták el. A stratégiai feladatok elemzése során ugyancsak fontos szempont volt a társadalmi elvárások és hatások értékelése. További feladat a javaslatok ismertetése, egyeztetése az érdekelttekkel és az érdeklődőkkel egyaránt. 2010-ben a kutatócsoport tagjai 4 ismeretterjesztő előadást tartottak és jelentős szerepet vállaltak a Mindentudás Egyeteme vízzel foglalkozó blokkjának előkészítésben.

A vízgazdálkodás kiemelt problémáival foglalkozó projekteknél (SCENES, WaterRisk, CC-WaterS) társadalmi gazdasági forgatókönyvek elemzése, illetve erre alkalmas szoftverek kidolgozása folyik, fontos szempontként tekintve a döntéshozók támogatását. A Nemzeti Víztechnológiai Platform tevékenysége ugyancsak forgatókönyvek elemzésén alapul, emellett a K+F+I javaslatok kidolgozása és egyeztetése érdekében 3 szakmai fórumra került sor. Az érdekeltek tájékoztatását szolgálta 5 előadás és a különböző folyóiratokban megjelent 6 cikk.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A nemzetközi együttműködésben megvalósuló SCENES projekt kidolgozásában a munkacsoport 1 tagja és 1 támogató tagja, míg a Dél-kelet Európai Együttműködés keretében készülő CC-WaterS projekt kidolgozásában a kutatócsoport 1 tagja vett részt.

A kutatócsoport vezetője elnöke a Magyar Szennyvíztechnikai Szövetségnek, tagja a következő testületeknek: External Advisory Panel of Public Utility Board of Singapore, UN World Water Assessment Technical Advisory Committee, Editorial Board of Ecohydrology and Hydrobiology, továbbá két kuratóriumnak. Egy-egy kutató tagja a következő szervezeteknek: IPCC Víz Munkacsoport, EU COST Action 869 2. Munkacsoport, Global Lake Ecological Observatory Network (GLEON) (ennek a kutatócsoport intézményi tagja is).

Oktatási és kutatási kapcsolatok 14 külföldi egyetemmel (Bécs, Graz, Karlsruhe, München, Zürich, Varsó, Prága, Lyngby, Trondheim, Cornell, Brüsszel, Gent, Massachusetts, Florida, Ankara), valamint a IIASA-val és a Kínai Tudományos Akadémia Wuhan Hidrobiológiai Intézetével létesültek. A hazai kapcsolatok túlnyomóan a projektek végrehajtásához kötődnek. Szoros együttműködés alakult ki az MTA kutatóhelyeivel (TAKI, Földrajztudományi Kutatóintézet, BLKI, ÖBKI, Duna Kutató Állomás), a Corvinus, a Debreceni, a Szegedi, a Szent István és a Veszprémi Egyetemmel, a VITUKI-val, a Környezetvédelmi és Vízügyi Igazgatóságokkal, Nemzeti Park Igazgatóságokkal.

A kétoldalú kínai-magyar TÉT projekt (CN-4/07) keretében a Kínai Akadémia Wuhan Hidrobiológiai Intézetéből négy kutató látogatott Magyarországra, és a kutatócsoport 2 tagja 2 külső kutató társaságában 2 hetet töltött Kínában, ahol részt vettek a GLEON Nankingban rendezett 12. Találkozóján is. A 2010-ben rendelkezésre álló pályázati összeg 2,4 millió Ft volt. A projekt vezetője magyar részről a kutatócsoport tagja.

Előadások: a különböző szakmai fórumokon 2009-ban a kutatócsoport vezetője, tagjai és a támogató tagok 9 tudományos (ebből 1 külföldön) előadást tartottak.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2010-ben a kutatócsoport a Tanszék révén 1 EU-FP6-os, 1 Dél-kelet Európai Együttműködés (SEE) keretében megvalósuló, 1 EU-támogatású hazai (KEOP), 2 NKFP projekt és egy magyar-osztrák kétoldalú projekt kidolgozásában vett részt. A projektek 2010-re jutó költségkerete összesen 111 millió Ft, alvállalkozók nélkül 53 millió Ft volt. Részletek a II. fejezetben és a pályázatok adatbázisában találhatóak.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Honti M, Istvánovics V, Kovács ÁS: Balancing between retention and flushing in river networks – optimizing nutrient management to improve trophic state. *Science of the Total Environment*, 408: 4712-4721 (2010)
2. Istvánovics V, Honti M, Vörös L, Kozma ZS: Phytoplankton dynamics in relation to connectivity; flow dynamics and resource availability - the case of a large; lowland river; the Hungarian Tisza. *Hydrobiologia*, 637: 121-141 (2010)
3. Koncsos L, Balogh E: A simulation-optimisation methodology for designing the operation of emergency reservoirs in the Hungarian Tisza basin. *Periodica Polytechnica-Civil Engineering* 54:(2) 101-106 (2010)
4. Somlyódy L, Nováky B, Simonffy Z: Éghajlatváltozás, szélsőségek és vízgazdálkodás. *Klíma-21 füzetek* 61: (2010)
5. Vörös M, Istvánovics V, Weidinger T: Applicability of the Flake model to Lake Balaton. *Boreal Environment Research*, 15: 245-254 (2010)
6. Fleit E, Somlyódy L, Szabó A, Sándor D, Fetter É: Az innováció szerepe a települési vízgazdálkodás hosszú távú fenntarthatóságában. *Vízmű Panoráma* (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4	Ebből kutató ² :	2
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			6
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			6
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 2	idegen nyelven:	1
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	3
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	6,35	Összes független hivatkozás száma:	35
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	35		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			1
	posztterek száma:		0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		25,4	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	111,2
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			3
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	29,3
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	52,0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	6,2
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		8,4	MFt

DE HOMOGEN KATALÍZIS KUTATÓCSOPORT

Joó Ferenc, az MTA rendes tagja
4010 Debrecen, Pf. 7
telefon: 52-512 900; fax: 52-512 915
e-mail: joo.ferenc@science.unideb.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatócsoport általános feladata a vizes közegű homogén katalitikus folyamatok és a vizeszerves kétfázisú katalízis kutatása. A víz, mint oldószer használatának minél szélesebb körű elterjesztése a szerves és fémorganikus szintézisekben –más előnyök mellett– nagymértékben csökkenti a környezetszennyezés veszélyét. Ez a kutatás magában foglalja új ligandumok és katalizátorok szintézisét és jellemzését, valamint egyes fontos katalitikus folyamatok részletes vizsgálatát. A beszámolási évben ezek közé tartozott két környezeti szempontból önmagában is kiemelkedő fontosságú terület: a szén-dioxid hidrogénezése és formiátok katalitikus bontása továbbá egyes halogénezett szénhidrogének katalitikus hidrodehalogénezése. Fontos feladat volt az allil-alkoholok redox izomerizációjának vizsgálata vizes közegben, minthogy ez a szintetikus értékes folyamat 100% atomhatékonyságú. Ugyancsak a kémiai folyamatok hatékonyabbá tételére irányultak a kutatócsoport fotokémiai vizsgálatai, elsősorban katalitikusan aktív Ru(II)-komplexek fotokémiai átalakulásainak tanulmányozása. A biológiai membránok módosítása katalitikus hidrogénezéssel hozzájárulhat az un. membrán lipid-terápia kifejlesztéséhez. Erre a célra feladatul tűzték ki fluoreszkáló hidrogénező katalizátorok kifejlesztését. Fontos feladat volt a számítástechnikai kémiai kutatások megindítása a kutatócsoportban, mert az ilyen típusú kutatások a jövőben egyre nagyobb szerephez jutnak.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Új vízdoldható N-heterociklusos karbén (NHC) prekursorait állították elő a katalízisben jelentős szerepet játszó ismert imidazólium sók (IMes, SIMes) szulfonálásával. Utóbbiak Au(I) komplexei kiemelkedő katalitikus aktivitást mutattak alkinek hidratálásában.

Az Almeriai Egyetem (Spanyolország) kutatóival együttműködésben befejezték a $[\text{RuCl}(\text{Cp})(\text{mPTA})_2](\text{OSO}_2\text{CF}_3)_2$ és $[\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})(\text{Cp})(\text{mPTA})_2](\text{OSO}_2\text{CF}_3)_3$ katalizátorok (Cp = ciklopentadienil, mPTA = 1-metil-1,3,5-triaza-7-foszfadamantán) vizsgálatát allil-alkoholok redox izomerizációjában. Az erről megjelent közleményük a J. Molecular Catalysis A: Chemical folyóirat „Editor’s choice” kitüntető minősítését érdemelte ki.

Az almeriai kutatókkal együttműködésben a $[\text{RuCl}(\text{Cp})(\text{PPh}_3)(\text{HdmoPTA})](\text{OSO}_2\text{CF}_3)$ (HdmoPTA = 3,7-H-3,7-dimetil-1,3,7-triaza-5-foszfabiciklo[3.3.1]nonán) komplexet sikerrel alkalmazták allil-alkoholok redox izomerizációjának katalizátoraként. Megállapították, hogy a reakciót a vizes közeg alkalmazása elősegíti. A Ru-komplex katalizátor a vizes fázisban ismételtelen felhasználhatónak bizonyult; ez a két folyadékfázisú katalízis módszerének egyik fontos célja.

Együttműködés keretében az Almeriai Egyetemmel megállapították, hogy a $[\text{RuCl}_2(\text{dmsO})_4]$ komplex pta jelenlétében végzett fotolízisekor $[\text{Ru}_2\text{Cl}_3(\text{pta})_6]\text{Cl}$ képződik. Multinukleáris NMR-spektroszkópia segítségével azonosították a fotokémiai átalakulás során képződő intermediereket; ezek közül a $[\text{RuCl}_3(\text{Hpta})_3]^{2+}$ komplex szerkezetét egykristály röntgendiffrakciós módszerrel is meghatározták. Előállították a $[\text{RuCl}_2(\text{N-metil-pta})_2(\text{dmsO})_2](\text{CF}_3\text{SO}_3)_2$ összetételű komplexet, amely szintén fotoaktívnak bizonyult.

Biológiai membránok hidrogénezéséhez fluoreszkáló ligandumokat állítottak elő. Az etilén-diamin és ciklohexán-diamin danzilezésével nyert ligandumok és $[\{\text{RuCl}_2(p\text{-cimol})\}_2]$ reakciójában képződő komplexek viszont nem fluoreszkálnak, feltehetően a fluoreszcenciában is szerepet játszó N-atomok koordinációja miatt. Ezt a problémát danzilezett dietilén-triamin (Dz-dta) előállításával és alkalmazásával sikerült megoldani; a $[\text{RuCl}_2(p\text{-cimol})(\text{Dz-dta})]$ komplex intenzív fluoreszcenciát mutat. A kialakuló félszendvics-komplexeket katalitikusan aktívnak találták maleinsav, acetofenon és fenilacetilén hidrogénezésében.

A hangyasav a hidrogén tárolásának megfelelő anyaga lehet, viszont a bontás során képződő szén-dioxid közvetlenül nem hidrogénezhető vissza hangyasavvá, csak aminok jelenlétében, vagy karbonát ill. hidrogénkarbonát sók formájában. A kutatócsoportban megállapították, hogy egyes vízoldható Ru(II)-foszfinkomplexek jó aktivitást mutatnak vizes oldatban a HCO_2^- katalitikus bontásában hidrogénre és hidrogénkarbonátra és azt, hogy ez a reakció ciklusba kapcsolható a képződő HCO_3^- ugyanazzal a katalizátorral történő visszahidrogénezésével.

Polimerekkel stabilizált fémszólókat alkalmaztak szerves halogénszármazékok hidrodehalogénezésére. Megállapították, hogy a Pd-tartalmú katalizátorok aktívan dehalogénezik a benzil-kloridot és a klórbenzolt vizes közegben, bázis alkalmazása nélkül is. A képződő HCl hatására megváltozik a katalizátor morfológiája és idővel csökken az aktivitása. Kiépítettek egy pH-potenciometriás mérőrendszert, mellyel pH-sztatikus módon tudják a dehalogénezési reakciókat követni. A berendezéssel a reakciók automatikus időbeli követése, azaz a kinetikájának a meghatározása is lehetséges.

A ThalesNano Zrt. nyílt, áramlásos reaktorának alkalmazásával (H-Cube[®]) megvizsgálták több kereskedelmi hidrogénező katalizátor aktivitását klórbenzol és benzil-klorid dehalogénezésében. A 18 vizsgált katalizátor közül a Pd/C bizonyult legaktívabbnak, amely stabilisabb is volt, mint pl. a Raney-Ni.

Elméleti kémiai (DFT) számításokkal vizsgálták a hidrodehalogénezési reakciók mechanizmusát a szulfonált szalén nikkell(II), ródium(III) illetve palládium(II) komplexei esetében. A számítások tetraklóretén szubsztrátumra gázfázisban történtek. Megállapították, hogy érdemi katalitikus aktivitás a *síknégyzetes* Pd(II)-szulfoszalén komplextől várható.

A felsorolt kutatások a II.b pontban írottak szerint szakmailag és társadalmi szempontból is időszerűek. A klórozott szénhidrogének dehalogénezésében és a heterogén katalizátorok minősítésében a gazdasági szféra érdeklődése és támogatása is megnyilvánult (vállalati hozzájárulás pályázati önrészhez).

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport kutatásainak túlnyomó része fontos társadalmi problémák megoldási lehetőségeinek megkereséséhez kapcsolódott. A halogénezett szerves vegyületek hidrodehalogénezése a szennyezett vizek megtisztításához járulhat hozzá – ilyen igény az Észak-Alföldi régió számos helyén felmerül. A szén-dioxid hidrogénezés/formiát bontás ciklusa a hidrogén tárolás és fejlesztés terén vezethet új megoldáshoz. A vizes közegű és kétfázisú katalitikus eljárások alkalmazása csökkenti a környezetszennyezés veszélyét. A kutatócsoport vezetője több egyetemi sajtótájékoztatón és egy helyi rádióadásban beszélt a kutatások céljáról és az eredmények felhasználási lehetőségeiről.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A biológiai membránok katalitikus módosításának vizsgálatát az MTA SZBK Biokémiai Intézete munkatársaival végezték, a fluoreszcens anyagok jellemzése az SZBK-ban történt.

Nemzetközi együttműködésben végeztek kutatásokat a kétfázisú katalízis terén az Almeriai Egyetem (Spanyolország) kutatóival. Különösen jelentős volt az együttműködés a fotokémiai vizsgálatok terén, melyet az Almeriai Egyetem fotokémiai laboratóriumában közösen végeztek a magyar és spanyol résztvevők.

A formiátok katalitikus bontása terén az EPFL (Lausanne, Svájc) kutatóival folytattak együttműködést, elsősorban nagynyomású NMR mérések ottani elvégzése céljából.

A kutatócsoport jelentős súllyal részt vesz abban az EU FP 7 pályázatban (Unlocking and developing the research potential of research entities established in the EU's convergence region, REGPOT-2010-1) melyet a Debreceni Egyetem nyújtott be 2010-ben Renewable Chemical Research for Molecular Mechanisms, Properties and Applications at the University of Debrecen (RECHEM), címmel. A pályázat elbírálása folyamatban van.

A kutatócsoport munkatársai 2010-ben is részt vettek a Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék oktatómunkájában, laboratóriumi gyakorlatok vezetésével (átlagosan 4 óra/fő/hét).

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A 2010. év kiemelkedő pályázati eseménye, hogy a kutatócsoport, teljes alapkutatási témakörével, részt vett egy sikeres NFÜ TÁMOP pályázatban (TÁMOP-4.2.1B-09/1/KONV.; A felsőoktatás minőségének javítása a kutatás-fejlesztés-innováció-oktatás fejlesztésén keresztül a Debreceni Egyetemen), melyen belül a kutatócsoport vezetője vezeti a Molekulatudomány alprojektet. A Homogén Katalízis Kutatócsoport 2010. július 1-i kezdéssel 24 hónapra 34,25 Mft működési és 14,8 Mft műszerbeszerzési támogatást használhat fel.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Gonzalez B, Lorenzo-Luis P, Serrano-Ruiz M, Papp É, Fekete M, Csépe K, et al. (3, Joó F): Catalysis of redox isomerization of allylic alcohols by $[\text{RuCl}(\text{Cp})(\text{mPTA})_2](\text{OSO}_2\text{CF}_3)_2$ and $[\text{Ru}(\text{OH}_2-\kappa\text{O})(\text{Cp})(\text{mPTA})_2](\text{OSO}_2\text{CF}_3)_3 \cdot (\text{H}_2\text{O})-(\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O})_{0.5}$. Unusual influence of the pH and interaction of phosphate with catalyst on the reaction rate. *J. Mol. Catal. A: Chemical*, 326: 15-20 (2010)
2. Almássy A, Nagy CsE, Bényei AC, Joó F: Novel sulfonated N-heterocyclic carbene gold(I) complexes: Homogeneous gold catalysis for the hydration of terminal alkynes in aqueous media. *Organometallics*, 29: 2484-2490 (2010)
3. Purgel M, Baranyai Zs, de Blas A, Rodríguez-Blas T, Bányai I, Platas-Iglesias C, et al. (1): An NMR and DFT Investigation on the Conformational Properties of Lanthanide(III) 1,4,7,10-Tetraazacyclododecane-1,4,7,10-tetraacetate Analogues Containing Methylenephosphonate Pendant Arms. *Inorg. Chem.*, 49: 4370-4382 (2010)
4. Joó F, Kathó Á: Water as green solvent for bulk chemicals. *In Handbook of Green Chemistry*, Vol. 5 (C.J. Li, ed.), Wiley-VCH, 389-408 (2010)
5. Joó F: Biphasic catalysis (homogeneous). *In Encyclopedia of Catalysis* (I. T. Horváth, ed.-in-chief), 2nd revised ed. Wiley, New York; Published online 15 Sept (2010) DOI: 10.1002/0471227617. <http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/0471227617>

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: DE Homogén Katalízis Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	4	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	6
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :	6
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban magyarul:	0
idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban magyarul:	0
idegen nyelven:	3
Ebből impaktfakt. publ, térkép magyarul:	0
idegen nyelven:	3
Könyv ⁸ magyarul:	0
idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹ magyarul:	0
idegen nyelven:	3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	11,0	Összes független hivatkozás száma:	181
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	222		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :	2
posztterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1
Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :	5
Témavezetések száma: TDK munka:	4
Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	3
PhD:	4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	14,0	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:
		35,2 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		2
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	6,4	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:		0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
ÚMFT témák száma:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		28,8 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:		0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		0 MFt

DE SZÁMELMÉLETI KUTATÓCSOPORT

Pethő Attila, az MTA levelező tagja
4010 Debecen, Pf. 12.
telefon: 52-512 900/22681; fax: 52-416 857
e-mail: petho.attila@inf.unideb.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A Debreceni Egyetemen egy nagyobb létszámú számelméleti kutatócsoport működik, melynek tagjai közül hat fő volt TKI állományú, rész munkaidőben foglalkoztatott kutató. A beszámoló csupán az akadémiai támogatásban részesült kutatók, és a Debreceni Egyetem alkalmazásában álló kutatócsoport-vezetőnek és társ-pályázónak a tevékenységére vonatkozik.

2010 februárjában a kutatócsoport korábbi vezetője betöltötte a 70. életévét, ezért a csoport adminisztratív vezetése megváltozott.

A kutatócsoport kutatási témája: Diofantikus számelmélet és alkalmazásai. Kutatásaikat 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, normaforma egyenletek megoldásainak koordinátaiban található számtani sorozatok és kapcsolatuk adott normájú algebrai egészekkel, Schur-típusú és Pólya-típusú irreducibilitási problémák, rögzített számú zérushellyel és pólussal rendelkező racionális törtfüggvények, Recaman és Jacobsthal egy-egy régi számelméleti problémája.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport tagjai szinte valamennyi vizsgált területen fontos új eredményeket értek el.

Tovább folytatták binom Thue-egyenletek, valamint ternér egyenletek teljes megoldására vonatkozó kutatásaikat és ilyen típusú egyenletek újabb osztályainak összes megoldását meghatározták abban az általános esetben, amikor a kitevők is ismeretlenek, az együtthatók pedig ismeretlen S -egységek, illetve adott korlátnál kisebb egészek. Végességi állításokat nyertek normaforma egyenletek megoldásainak koordinátaiban található számtani sorozatok hosszával kapcsolatban. Ezek fontos alkalmazásokat eredményeztek adott normájú algebrai egészekre vonatkozóan. Több klasszikus Schur-típusú, valamint Pólya-típusú irreducibilitási tétel jelentős kiterjesztését, élesítését adták. Zannier egy polinomokra vonatkozó nevezetes tételének analógiaként megmutatták, hogy effektíve meghatározhatók mindazok a racionális törtfüggvények, amelyeknek rögzített számú zérushelye és pólusa van, és nemtriviális módon felbonthatók. Megoldották Jacobsthal egy 50 éves problémáját. A kutatócsoport elméleti kutatásainak közvetlen gazdasági-társadalmi hasznosíthatóságát is alátámasztva, jelentős eredményeket értek el a digitális képfeldolgozás területén fontos szerepet játszó szomszédsági sorozatokra valamint aszimmetrikus titkosítási protokollok elektronikus vizsgáztatási rendszerben való alkalmazására vonatkozóan.

A kutatócsoport vezetőjét a Magyar Tudományos Akadémia levelező tagjává választotta. A kutatócsoport két tagja megvédte az akadémiai doktori értekezését, egy tagja pedig PhD fokozatot szerzett.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai mindannyian egyetemi oktatók, így közvetlenül részt vesznek a szakmai utánpótlás nevelésében. Oktatói tevékenységük során a fiatal generációnak közvetítik a nemzetközi tudomány legújabb eredményeit és problémáit. Munkájuk sikerességét mutatja, hogy vezetésük mellett folyamatosan készülnek diplomamunkák, szak- és TDK dolgozatok és számos PhD hallgató kutatásait segítik. Aktívan vesznek részt a tehetséggondozó programokban is.

A kutatócsoport döntően alapkutatásokat folytat. Törekszik azonban arra, hogy eredményeit az alkalmazott kutatásokban és fejlesztésekben is kamatoztassa. A kutatócsoport vezetője kezdeményezte a Debreceni Infopark megalapítását és kezdeményezően vesz részt a Debrecen és az egész Észak-Alföldi régió fejlődése szempontjából is igen fontos informatikai projektek generálásában és végrehajtásában. Kriptográfiai kutatásaink eredményeit ezekben közvetlenül is hasznosíthatjuk.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport kutatóhelyi támogatásban részesült tagjai szoros együttműködésben dolgoznak egymással, valamint más debreceni és budapesti számelméletes kollégákkal. Széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Közös kutatásokat folytattak osztrák, angol, indiai, török és mexikói matematikusokkal. A nemzetközi együttműködésből *hat* közlemény született az V. részben felsorolt publikációk közül.

A csoport tagjai (részben Tét pályázatok keretében) rövidebb-hosszabb tanulmányúton vettek részt és előadásokat tartottak a Grazi és Berlini Műszaki Egyetemen, a Leideni, a Révkomáromi és a Zágrábi Egyetemen, a Szegedi Tudományegyetemen, a Nyíregyházi Főiskolán, valamint a mexikói Morelia Egyetemen.

Közös kutatások végzése céljából egy-egy hétre Debrecenbe látogatott *hat* külföldi kolléga, valamint egy osztrák kolléga egy éves időtartamra, osztrák ösztöndíjjal.

Az év során a csoport tagjai számos előadást tartottak jelentős nemzetközi konferenciákon Berlinben, Milánóban, Marseille-Luminyben, Banffban, Wolfvilleben (Kanada), Bedlewoiban, Bukowina Tatrzańskában (Lengyelország), Zágrábban, Koperben (Szlovénia), Egerben és Debrecenben.

A kutatócsoport 2010 októberében nemzetközi konferenciát rendezett Debrecenben Győry Kálmán és Sárközy András 70. valamint és Pethő Attila és Pintz János 60. születésnapja alkalmából.

A kutatócsoport tagjai tevékenyen részt vesznek a Debreceni Egyetemen folyó oktató és egyéb kutató munkákban.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai témavezetőként illetve közreműködőként a következő hazai és nemzetközi pályázatokban vettek részt:

- OTKA T67580, OTKA F68872, OTKA K75566,
- Magyar-horvát Tét, Magyar-mexikói Tét, Magyar-osztrák Tét,
- TÁMOP 4.2.1./B-09/1/KONV-2010-0007 pályázat keretén belül (Kriptográfiai algoritmusok és protokollok).

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bazsó A: On binomial Thue equations and ternary equations with S-unit coefficients. *Publicationes Mathematicae-Debrecen* 77(3-4): 499-516 (2010)
2. Bazsó A, Bérczes A, Győry K, Pintér Á: On the resolution of equations $Ax^n - By^n = C$ in integers x, y and $n \geq 3$, II. *Publicationes Mathematicae-Debrecen*, 76(1-2): 227-250 (2010)
3. Bérczes A: On the sumsets of geometric progressions. *Publicationes Mathematicae-Debrecen*, 77: 261-276 (2010)
4. Bérczes A, Folláth J, Pethő A: On a family of preimage-resistant functions. *Tatra Mountains Mathematical Publications*, 47: 1-13 (2010)
5. Bérczes A, Hajdu L, Pethő A: Arithmetic progressions in the solution sets of norm form equations. *Rocky Mountain Journal of Mathematics*, 40(2): 383-395 (2010)
6. Bérczes A, Liptai K, Pink I: On balancing recurrence sequences. *Fibonacci Quarterly*, 48: 121-128 (2010)
7. Cangul IN, Demirci M, Luca F, Pintér Á, Soydan G: On the diophantine equation $x^2 + 2^a 11^b = y^n$. *Fibonacci Quarterly*, 48: 39-46 (2010)
8. Győry K: S-unit equations in number fields: effective results, generalizations, abc-conjecture. In: Tsumura H, Komori Y (szerk.) *Kokyuroku 1710: Analytic number theory and related topics*. Kyoto, Japán, 2009.10.14-2009.10.16. Kyoto: Kyoto University, Research Institute for Mathematical Sciences, 71-84 (2010)
9. Győry K, Smyth C: The divisibility of $a^n - b^n$ by powers of n . *Integers*, 10: 319-334 (2010)
10. Hajdu L, Saradha N: On a problem of Pillai and its generalizations. *Acta Arithmetica*, 144: 323-347 (2010)
11. Hajdu L, Luca F: On the length of arithmetic progressions in linear combinations of S-units. *Archiv Der Mathematik*, 94: 357-363 (2010)
12. Huszti A, Pethő A, A secure electronic exam system. *Publicationes Mathematicae Debrecen*, 77(3-4): 299-312 (2010)
13. Kirschenhofer P, Pethő A, Surer P, Thuswaldner J: Finite and periodic orbits of shift radix systems. *Journal de Théorie des Nombres de Bordeaux*, 22: 421-448 (2010)
14. Pethő A: Fifteen problems in number theory. *Acta Universitatis Sapientiae Mathematica*, 2: 72-83 (2010)
15. Pethő A: On the distribution of Pisot and CNS polynomials. In: Tsumura H, Komori Y (szerk.) *Kokyuroku 1710: Analytic number theory and related topics*. Kyoto, Japán, 2009.10.14-2009.10.16. Kyoto: Kyoto University, Research Institute for Mathematical Sciences, 85-92 (2010)
16. Pintér Á, van der Poorten A: A simple observation on simple zeros. *Archiv der Mathematik*, 95(4): 355-361 (2010)
17. Rakaczki Cs: On some diophantine results related to Hermite polynomials. *Functiones Et Approximatio-Commentarii Mathematici*, 42(1): 7-16 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: DE Számelméleti Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	3	Ebből kutató ² :	3
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			16
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	4
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	11
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	10
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	4,38	Összes független hivatkozás száma:	78
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	104		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:
			1
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			22
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			8
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	7
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		13,3	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	12,9
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		7,3	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			3
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3,8
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,8
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0

DE SZÉNHIDRÁTKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Antus Sándor, az MTA rendes tagja
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
telefon: 52-512 900/22471; fax: 52-453 436
e-mail: antus.sandor@science.unideb.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A Debreceni Egyetem-MTA Szénhidrátkémiai Kutatócsoport főleg alapkutatásokkal foglalkozott, amelynek során kémiai és jelentős hányaddal biokémiai, gyógyszerkémiai és immunológiai törvényszerűségek felismerésére is törekedett, figyelemmel kísérve 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 O-heterociklusok szintézise, e munka során gyógyszerek fejlesztését elősegítő hatás-szerkezet összefüggések felismerése.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

- A glikogén-foszforilázt (GP) gátló hatású vegyületek potenciális antidiabetikumnak tekinthetők. A korábbi munka folytatásaként számos béta-D-glükózil-1,4-benzodioxán származék szintézisét valósította meg, és közülük több már mikromólos koncentrációban is gátolta a GP enzim által katalizált glikogén lebontást. (1. közlemény)
- Az elmúlt években a fokozódó szójafogyasztás révén az izoflavonoidok iránt jelentős molekuláris biológiai érdeklődés mutatkozott meg. E táplálék gazdag ugyanis fitoösztrogénekben (izoflavonoidokban), melyek az ösztrogén receptorokon keresztül kedvezően befolyásolják számos élettanilag fontos funkcionkat [prosztata működés (rákos elváltozás), csontok kalcium anyagcseréje (osteoporózis), az LDL-hez kötött koleszterin (kardioprotektív hatás)]. A kutatócsoportunk gyógyszerári forgalomban lévő Osteochin^R (7-izopropiloxiizo-flavon) pterokarpán típusú karba-, aza-struktúranalógjainak előállítását oldotta meg. E vegyületek farmakológiai vizsgálata is megkezdődött.
- Egyszerű morfinból kiinduló 5 lépéses szintézist dolgozott ki benzoxazollal funkcionlizált származékainak előállítására. E vegyületek farmakológiai vizsgálata értékes információkat adott az opioid receptorok topológiájáról. (2. közlemény)
- A dopaminerg vegyületek a Parkinson-kór gyógyításában potenciális farmakonok. Ilyen típusú O-heterociklusok szintézisére irányuló kutatás során figyelemre méltó dopamin D₄ antagonistá hatású 1,3-diszubsztituált izokrománok enantio szelektív szintézisét oldotta meg csoportunk és kimutatta, hogy a hatás szempontjából a kiralitás centrumok abszolút konfigurációjának (1S, 3S) meghatározó szerepe van. (3. közlemény)
- Az állati forrásból izolált heparin poliszacharid és szintetikus pentaszacharid analógja a leggyakrabban használt véralvadásgátló szer. Előállították a heparinból levezethető triszacharid egységek szulfonsav analógjait valamint a pentaszacharid egy diszulfonsav és egy triszulfonsav származékát, és megvizsgálták véralvadásgátló tulajdonságukat. Az egyik új pentaszacharid valamennyi eddig ismert származéknál jobb antikoaguláns hatást mutatott. (4. közlemény)
- A *Staphylococcus aureus* és a *S. epidermidis* humán fertőzéseket okozó opportunistá mikroorganizmusok N-acetil-D-glükózaminból béta-(1→6)-kötéssel felépülő sejtfelszíni poliszacharidja antigén hatással rendelkezik. Sikeresen megvalósították e sejtfelszíni poliszacharid di-, tetra- és hexaszacharid fragmenseinek szintézisét, és ezek immunogén

proteinhez történő kapcsolását alkalmasan választott hídmolekulán keresztül. Az így nyert neoglikoproteinek potenciálisan *Staphylococcus* fertőzések elleni védőoltások lehetnek.

- Előállították a gyulladáshoz és rákos áttétek kialakulásában kulcsszerepet játszó, a rákos megbetegedések diagnosztizálásában tumor markerként használt triszacharid (szialil Lewis^a) szulfonsav mimetikumait. A vegyületek terápiás és diagnosztikai jelentőséggel bírhatnak. (5. publikáció)
- A dispersin B enzim egy β -*N*-acetilglükózaminidáz, amely képes hasítani *S. epidermidis* baktériumok úgynevezett biofilmjét, amelynek főkomponense poli-béta-*N*-acetil-D-glükózamin, ezért ez az enzim antibiofilm ágensként alkalmas lehet a *S. epidermidis*-szel fertőzött orvosi eszközök sterilizálására. Az enzim további tanulmányozásához tiofenil aglikonnal rendelkező, *N*-acetil-glükózamin-béta-(1→6) oligomer szubsztrát sorozatot állítottak elő. Vizsgálták a Dispersin B enzimkinetikai paramétereit, és elkészítették az enzim alhely-térképét.
- A DE OEC Gyógyszerészi Kémia Tanszékkal közösen kísérleti és elméleti módszerekkel vizsgálták két polién makrolid antibiotikumszármazék cikloaddíciós reakcióját. Kvantumkémiai módszerekkel és kinetikai mérésekkel vizsgálták dioxolán gyűrűs acetálok parciális hidrogenolízisét szabad szomszédos hidroxilcsoport jelenlétében. Kínai partnerekkel közösen meghatározták több, tengeri élőlényből izolált vegyület abszolút konfigurációját CD-mérések és számítások segítségével. (6. közlemény)
- A fent említett eredményeket is magába foglaló összefoglaló közleményben számoltak be a biológiai aktív vegyületek kutatása során elért eredményeikről. (7. és 8. közlemény)

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

2010 szeptemberében a korábbi évekhez hasonlóan a Debreceni Egyetemen ismét megrendezésre került a Kutatók Éjszakája, ennek keretében laikusok is alapvető tudományos ismeretekhez juthattak. Előadások, kísérletek kerültek bemutatásra a tudományos munka iránti érdeklődés felkeltésére. A kutatócsoport bemutatót tartott öt csoportnak a molekulamodellről, melynek keretében az érdeklődők a legszükségesebb alapfogalmak mellett néhány szemléletes példán keresztül megismerkedhettek a módszerek alkalmazhatóságával. A résztvevők kutatói felügyelet mellett önállóan is kipróbálhatták a módszerek egy részét egyszerű molekulák esetén (molekulák rajzolása, optimalás, TS számítás, konformáció-keresés, dinamika).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport eredményesen együttműködött az alábbi intézetekkel:

- Department of Chemistry, University of Paderborn
- Institut für Mikrobiologie, TU Braunschweig
- Dipartimento di Chimica Industriale, Università di Pisa
- DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
- DE OEC Gyógyszerészi Kémia Tanszék
- MTA-DE Thrombosis és Haemostasis Kutatócsoport
- DE Fizikai Kémiai Tanszék Röntgendiffrakciós Laboratóriuma
- Institute of Organic Chemistry, University of Hannover
- Department of Pharmaceutical Biology, University of Kiel
- Department of Oral Biology, University of Medicine and Dentistry of New Jersey
- State Key Laboratory of Drug Research Institute of Materia Medica Chinese Academy of Sciences
- DE OEC Klinikai Biokémiai és Molekuláris Pathológiai Intézet
- DE OEC Orvosi Vegytan

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport az elmúlt évben jelentős támogatást kapott az OTKA-tól.

K 62802 4 MFt, melyből készletbeszerzés 1,54 MFt

A pályázat témája: Szénhidrát-szulfonsav típusú szíalsav-mimetikumok szintézise és neuraminidázgátló hatásuk vizsgálata

PD 73064 3,284 MFt, melyből készletbeszerzés 1,6 MFt

A pályázat témája: Poli-béta-(1-6)-N-acetil glükózamin spacerrel ellátott oligoszacharid sorozatának és ezek fehérje konjugátumainak szintézise

T 049436 4,455 MFt

A pályázat témája: Potenciálisan biológiailag aktív természetes eredetű O- és N-hetrociklusos vegyületek és analógjaik szintézise, kiroptikai és farmakológiai sajátosságai vizsgálata

TÁMOP 4.2.1./B-09/1/KONV-2010-0007 9,5 MFt, melyből anyagjellegű költség 1,738 MFt

A pályázat témája: Potenciálisan antivirális, antibakteriális és véralvadásgátló hatású szénhidrát-szulfonsavak szintézise

TÁMOP 4.2.1./B-09/1/KONV-2010-0007. 14,25 MFt, melyből anyagjellegű költség 2,6 MFt

A pályázat témája: Természetes eredetű O-heterociklusok és rokon vegyületeik kutatása

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Czakó Z, Juhász L, Docsa T, Gergely P, Antus S: Synthesis and glycogen phosphorylase inhibitor activity of functionalized 1,4-benzodioxanes. *Pharmazie*, 65(4): 235-238 (2010)
2. Girán L, Gyulai Z, Antus S, Berényi S, Sipos A: Synthesis of morphinans with diversely functionalized benzoxazole moieties. *Monatshefte für Chemie*, 141: 1135-1143 (2010)
3. Kerti G, Kurtán T, Kövér KE, Sólyom S, Greiner I, Antus S: Synthesis and circular dichroism of optically active 1,3-disubstituted isochromans of dopamine D4 antagonist activity. *Tetrahedron Asymmetry*, 21(19): 2356-2360 (2010)
4. Lázár L, Herczeg M, Fekete A, Borbás A, Lipták A, Antus S: Synthesis of sulfonic acid analogues of the non-reducing end trisaccharide of the antithrombin binding domain of heparin. *Tetrahedron Letters*, 51(51): 6711-6714 (2010)
5. Jakab Z, Fekete A, Borbás A, Lipták A, Antus S: Synthesis of new sulfonic acid-containing oligosaccharide mimetics of sialyl Lewis A. *Tetrahedron*, 66(13): 2404-2414 (2010)
6. Fejes Z, Mándi A, Komáromi I, Majoros L, Batta G, Herczegh P: A synthetic and in silico study on the highly regioselective Diels-Alder reaction of the polyenic antifungal antibiotics natamycin and flavofungin. *Tetrahedron Letters*, 51 (38): 4968-4971 (2010)
7. Antus S: Biológiailag aktív vegyületek kutatása a Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszékén 1992-2009. III. rész. *Acta Pharmaceutica Hungarica*, 80: (1) 3-17 (2010)
8. Antus S: Biológiailag aktív vegyületek kutatása a Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszékén 1992-2009. IV. rész. *Acta Pharmaceutica Hungarica*, 80: (4) 131-136 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	8,5	Ebből kutató ² :	6,5
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			2
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			12
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	2	idegen nyelven:
			0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
			6
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	13,29	Összes független hivatkozás száma:	70
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	84		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			0
	posztterek száma:		1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	5
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		25,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	23,0
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	17,0	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	6,0
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0

ELTE EGERVÁRY JENŐ KOMBINATORIKUS OPTIMALIZÁLÁSI KUTATÓCSOPORT

Frank András, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C
telefon: 1-372 2500/8132; fax: 1-381 2158

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A tágabb értelemben vett Egerváry Jenő Kutatócsoport (<http://www.cs.elte.hu/egres/>) egy közösség, amelynek három fő feladata van:

- strukturális és algoritmikus vizsgálatok a kombinatorikus optimalizálás területén,
- számítógépes implementációk, különös tekintettel az általunk kezdeményezett LEMON diszkrét optimalizálási és modellezési C++ programkönyvtárra (<http://lemon.cs.elte.hu/>),
- ipari partnerek megrendelésére végzett konkrét fejlesztések.

A 3 fő irányzat egymással szoros együttműködésben dolgozik. A formális MTA-ELTE Egerváry Jenő Kutatócsoport főleg az első pont megvalósításában vesz részt.

A kutatócsoport szűkebb szakterülete a kombinatorikus optimalizálás és a gráfelmélet. E témakörök eredményei jól alkalmazhatók a hálózatok (pl számítógépes, telekommunikációs, közlekedési hálózatok) területén, ahol valamilyen kombinatorikus struktúrával modellezhető a vizsgált objektum. A csoport kutatási érdeklődését jól tükrözi az EGRES Open nevű online kutatási fórum (<http://www.cs.elte.hu/egres/open>), amely elősegíti a kérdésfelvetések és részeredmények megosztását a nemzetközi kutatóközösséggel.

A csoport által a kutatási eredmények publikálására létrehozott ISSN 1577-4451 számú EGRES Technical Report sorozatban 2010-ben 13 új publikáció jelent meg. Sikerült a 2010-re vállalt kutatási célkitűzéseikben előrelépni az útpakolások, a merevség és a matroidok közös bázisainak pakolása területén. A csoport eredményei 2010-ben szerepeltek olyan rangos konferenciákon, mint az IPCO, STOC, és SODA, illetve elfogadásra kerültek a 2011-ben megrendezendő STOC és IPCO konferenciákra. A kutatócsoport tagjai közül kettő az év folyamán szerezte meg PhD fokozatát.

A csoport kiemelt feladatának tekinti a felsőoktatási képzésben való részvételt, tagjai 2010-ben is oktattak az ELTE matematikus és informatikus képzésében. A hetente megtartott Egerváry Szemináriumon, melynek fő célja a kombinatorikus optimalizálás legújabb eredményeinek feldolgozása, több egyetemi hallgató és doktorandusz adott elő.

A 2010-es évben több együttműködési projekt is elindult a kutatócsoport és ipari partnerek, konkrétan az IBM és a Nokia Siemens Networks részvételével. Az IBM egy kutatólaborat is létesített az ELTE Operációkutatási Tanszékén. Az alkalmazott projektek megvalósításában is a LEMON könyvtár jelenti a kiindulópontot.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport vezetője a 2010-es évben fejezte be „Connections in Combinatorial Optimization” című könyvének megírását. A 640 oldalas kötet 2011 februárjában jelenik meg az Oxford University Press kiadó gondozásában. A csoport egy tagja 2010-ben Grünwald Emlékérmét kapott.

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport beszámolási évben elért kutatási eredményei területekre lebontva, a szerzők és publikációk számával.

Merevség

A csoport 2 tagja 2 dolgozatot írt ebben a témakörben. Bebizonyították, hogy minden 7-összefüggő molekuláris gráf generikusan merev 3 dimenzióban, illetve hogy egy 7-összefüggő gráfot egyértelműen meghatároz a 2-dimenziós merevségi matroidja.

Matroidok közös függetlenjeinek pakolása

A csoport 3 tagja más társszerzővel közösen 3 dolgozatot írt ebben a témakörben. Belátták, hogy Galvin jól ismert listaszínezési tétele általánosítható transzverzális matroidokra. Közös bázis pakolással kapcsolatban a csoport egyik tagja külföldi kutatókkal közösen írt dolgozatában több részeredményt is elért, például megmutatták, hogy az egyik matroidról feltehető, hogy partíciós.

Súlyozott éldiszjunkt S-utak

A csoport egyik tagja japán társszerzővel karakterizálta azon súlyfüggvényeket, amelyekre a maximális súlyú éldiszjunkt S-utak feladata polinom időben megoldható.

Éldiszjunkt részgráfok keresése

A csoport két tagja közös dolgozatban belátta, hogy számos gráf-particionálási feladat NP-teljes, pl. hogy létezik-e egy adott irányítatlan gráfban egy kör és egy tőle éldiszjunkt feszítőfa.

Fokszámkorlátos fedés erdőkkel

A csoport egyik tagja egy hongkongi matematikussal közösen bebizonyította, hogy bizonyos feltételek mellett egy gráf élhalmaza felbontható k fenyőre és egy fokszámkorlátos részgráfra. A bizonyításban egy lineáris programozási megközelítést ötvöztek sikeresen saját korábbi eredményükkel.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az ELTE Természettudományi Kara és a kar Hallgatói Alapítványa a 2009-es évben indította el az ELTE TTK Országos Diákkutatói Programot, amelynek célja az ország kiemelkedően tehetséges középiskolás diákjainak felkutatása, folyamatos gondozása, a természettudományi pálya iránti érdeklődésük felkeltése, erősítése. A kutatócsoport egyik tagja a program keretében irányította egy középiskolás hallgató munkáját a 2010-es évben.

A csoportvezető középiskolákban tartott kombinatorikus optimalizálást népszerűsítő előadásokat, egyik tag pedig a Középiskolai Matematikai és Fizikai Lapok Ifjúsági Anketján tartott előadást „Szenzorhálózatok algoritmikus problémáiról” címmel. A csoport egy tagja részt vesz a Kürschák József Matematikai Tanulóverseny szervezésében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Az ELTE Operációkutatási Tanszékén a csoport tagjai több tárgy oktatásában vettek részt (Egészértékű Programozás, Operációkutatás, Diszkrét Optimalizálás, Algoritmikus Játékelmélet). Ezen túl 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 amerikai, brit, francia, szlovák, japán matematikusok. A csoport a 2010-es évben vendégül látott 2 német, 1 cseh és 1 japán vendéget, és a csoport tagjai is elfogadtak vendégkutatói meghívásokat hong kong-i, prágai, müncheni és berlini kutatóintézetektől.

A csoport részt vett egy közös kutatási projektben a France Telecommal, melynek célja heterogén hálózatok optimalizálási kérdéseinek vizsgálata. A csoport tagjai a 2010-es évben több alkalmazott projektben is részt vettek olyan vállalatokkal való együttműködésben, mint az IBM vagy a Nokia Siemens Networks.

A csoport tagjai az év során számos előadást tartottak jelentős nemzetközi konferenciákon: IPCO (Lausanne), STOC (Cambridge, Massachusetts), Kyoto Prize Satellite Workshop (Tokyo), Graph Theory Workshop (Oberwolfach). A STOC konferencián bemutatott eredmény elnyerte a Best Student Paper Award kitüntetést. A csoport két tagja az IPCO konferencia programbizottságában szerepelt.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoportnak 2010 áprilisában indult a közös NKTH-OTKA Alaputatási Program keretében elnyert „Diszkrét optimalizálási algoritmusok és struktúrák” című, CK 80124 kódú pályázata. A pályázat 3 éves futamidejű és közel 50 millió Ft volumenű. Szintén 2010-ben nyerte el a kutatócsoport a „Kombinatorikus optimalizálás és alkalmazásai” című, JP-12/09 kódú japán-magyar TÉT pályázatot, melynek összege 3,5 millió Ft. A csoport egyik tagja „Kombinatorikus merevség és alkalmazásai” című, K81472 jelű egyszemélyes OTKA-pályázatot nyert el 2010-ben, 4 millió Ft értékben.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bérczi K., Frank A.: Packing Arborescences. In: Satoru Iwata szerk.) Combinatorial Optimization and Discrete Algorithms: RIMS Kôkyûroku Bessatsu B23, Kyoto University, Research Institute for Mathematical Sciences, 147-169 (2010)
2. Bernáth A., Grappe R, Szigeti Z: Partition constrained covering of a symmetric crossing supermodular function by a graph. In: Proceedings of the Twenty-First Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms. Philadelphia, USA, 1512-1520 (2010)
3. Biró P., Fleiner T.: The integral stable allocation problem on graphs. Discrete Optimization, 7(1-2): 64-73 (2010)
4. Cechlárová K., Fleiner T.: Housing Markets Through Graphs. Algorithmica, 58(1): 19-33 (2010)
5. Jackson B, Jordán T.: Brick partitions of graphs. Discrete Mathematics, 310(2): 270-275 (2010)
6. Jackson B, Jordán T.: Globally rigid circuits of the direction-length rigidity matroid. Journal of Combinatorial Theory Series B, 100(1): 1-22 (2010)
7. Jordán T.: Generically globally rigid zeolites in the plane. Information Processing Letters, 110(18-19): 841-844 (2010)
8. Király T., Pap J.: Kernels, Stable Matchings, and Scarf 's Lemma. In: Satoru Iwata (szerk.) Combinatorial Optimization and Discrete Algorithms: RIMS Kôkyûroku Bessatsu B23, Kyoto University, Research Institute for Mathematical Sciences, 131-145 (2010)
9. Király Z., Szabó J: Induced Graph Packing Problems. Graphs and Combinatorics, 26(2): 243-257 (2010)
10. Kovács E., Végh L.: Constructive Characterization Theorems in Combinatorial Optimization. In: Satoru Iwata(szerk.) Combinatorial Optimization and Discrete Algorithms: RIMS Kôkyûroku Bessatsu B23, Kyoto University, Research Institute for Mathematical Sciences, 131-145 (2010)
11. Végh L.: Augmenting undirected node-connectivity by one In: Proceedings of the 42nd ACM Symposium on Theory of Computing. New York, ACM: 563-572 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	3	Ebből kutató ² :	3
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	17		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :	17		
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban magyarul:	0	idegen nyelven:	10
Ebből impaktfakt. publ, térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Könyv ⁸ magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹ magyarul:	0	idegen nyelven:	5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	7,37	Összes független hivatkozás száma:	66
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	66		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	2	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :	4		
	posztterek száma:	0	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :	10		
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	8
Diplomamunka (MSc):	5	PhD:	2

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	12,3	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	22,8 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	12,5	MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt	
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	10,3 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

ELTE ELMÉLETI FIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Horváth Zalán, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1.A.
telefon: 1-372 2546; fax: 1-372 2509
e-mail: zalanh@ludens.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A csoport kutatásai a korábbi hagyományokra támaszkodva a térelmélet, 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.

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. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Részecskefizikai kutatások

A csoport egy tagja kollaborációban megalkotta a véges hőmérsékletű korrelátorok form faktor kifejtését integrálható térelméletekben, a véges térfogatbeli form faktorok általuk korábban kifejlesztett leírására alapozva. Ezzel egy másfél évtizede nyitott kérdéskörben érték el áttörést. A módszer továbbfejlesztésén és konkrét alkalmazásain jelenleg is dolgoznak.

A csoport másik tagja foglalkozott az AdS/CFT megfeleltetéssel. Maldacena 1998-ban megfogalmazott sejtése értelmében a tízdimenziós $AdS_5 \times S^5$ görbült háttéren mozgó szuperhúr ekvivalens a négydimenziós $N = 4$ szuperszimmetrikus $SU(N)$ mértékelmélettel. Kihhasználva a modellek $N \rightarrow \infty$ határesetben fennálló integrálhatóságát számos meggyőző bizonyítékot szolgáltatott már a sejtés alátámasztására. Az AdS/CFT közösség a sejtést mostanra elfogadta, és célul tűzte ki olyan eredmények származtatását, melyek korábban elérhetetlenek voltak mind a húr, mind pedig a mértékelméletek oldaláról. Ezen filozófiát követve sikerült operátorok anomális dimenzióját az effektív csatolásban ötöd- és hatodrendben kiszámolni. Az elmélet egy érdekes szektora determináns típusú mértékinvariáns operátorokat tartalmaz. Ezek anomális dimenziójának meghatározása peremes integrálható rendszerek segítségével lehetséges. Ebben a témakörben kifejlesztették a peremes integrálható rendszerek gerjesztett állapotainak végesméret-korrekcióit és alkalmazták a legegyszerűbb determináns típusú operátorok anomális dimenzióinak kiszámolásában.

Hosszú távú tervként szeretnék olyan mértékelmélet duálisát megkonstruálni, mely közelebb vezet a kvantumszindinamika megértéséhez. Első lépésként az $N=4$ szuperszimmetrikus elmélet olyan deformációját vizsgálták, mely vagy csak $N=1$ szuperszimmetriával rendelkezett, vagy egyáltalán nem volt szuperszimmetrikus. Sikerült ezen elméletekben olyan kétrészecske állapotok energiáját kiszámolniuk, melyet a mértékelmélet oldalon operátorok – korábban kiszámolt – anomális dimenziójával lehetett összehasonlítani. Teljes egyezést találtak, mely egyrészt a deformált modell integrálhatóságát, másrészt a megsejtett

dualitást igazolta. Meghatározták továbbá az elmélet megoldásában centrális szerepet betöltő szórás mátrixot, melynek segítségével a spektrum egzaktul leírható.

A részecskefizika Standard Modellje rendkívül sikeresen írja le az eddigi nagyenergiás kísérleteket. A nagy nemzetközi együttműködésben, magyar részvétellel folyó LHC, CERN kísérlet egyik fő feladata a szimmetriasértő szektor kísérleti feltérképezése. A Standard Modell egyetlen hiányzó részecskéje a szimmetriasértésért felelős Higgs skalár bozon, amely a modell elméleti problémáinak többségéért is felelős. Ezért különleges fontos alternatív modelleket vizsgálni, és azok jóslatait összevetni a kísérletekkel. A csoport tagjai erősen kölcsönható fermionokra épülő dinamikai modellt javasoltak a szimmetriasértő szektor alternatívájaként. A modellben a Higgs részecskét és kölcsönhatásait nem-királis fermionokra és effektív négyfermion kölcsönhatásaikra cserélték ki. Az új nem-királis fermionok kondenzátuma megfelelő módon sérti az elektromos szimmetriát, tömeget generál a mértékbozonoknak és az új fermionoknak is. Meghatározták továbbá az új részecskék keltésének rátáját (hatáskeresztmetszetét) az LHC jelenlegi energiaszintjén.

A modellben az 1-hurok elektromos precíziós mennyiségek számításához egy új, általános módszert dolgoztak ki 4-dimenziós impulzustérbeli levágás használatára. Az új eljárás megőrzi az elmélet szimmetriáit, a véges mennyiségek megegyeznek az általánosan használt dimenziós regularizációban számoltakkal. A módszerrel a háromszög anomáliát is egyértelműen sikerült kiszámolniuk, tervezik további alkalmazását effektív elméletekben.

Statisztikus fizikai kutatások

A csoport a Párizs-7 Egyetem munkatársaival a nem-egyensúlyi rendszerekben fellépő Casimir effektust vizsgálta. Elegendően egyszerű rendszert (kvantum XX spinláncot) és elegendően egyszerű nem-egyensúlyi stacionárius állapotot (állandó energiaáramot vivő állapotot) választva lehetővé vált a Casimir erő egzakt számolása. Az eredmények azt mutatják, hogy az energiaáram hatására a Casimir erő csökken. A csökkenés jól magyarázható, mivel a Casimir erő fluktuációkból ered, s megmutatható, hogy az energiaáram jelenlétében csökkennek a fluktuációk. Mivel fluxusok megjelenése általában csökkenti a fluktuációkat, általában várható, hogy a nemegyensúlyiság csökkenti a Casimir erőt.

Egy volt Marie Curie ösztöndíjas angol vendégkutatóval együttműködve folytatták a renormalizációs csoport módszer alkalmazását extrém statisztikák leírására. A véges méret problémák általuk előzőleg tárgyalt általános kérdésein túl, most a független, azonos eloszlással rendelkező, véletlen változó határeloszlásokból, s azok véges méret alakkorrekcióikból létrehozta egy praktikusán használható "képtárat".

Az év során folytatták a rövid-hatótávolságú végesdimenziós Ising spinűveget reprezentáló köbös replika-térelmélet kutatását. Egy olyan szabadenergia-funkcionált konstruáltak, amelyik csak a replika-ekvivalenciát használja ki, ily módon lehetőséget ad az ultrametrikusnál általánosabb replikaszimmetria-sértések vizsgálatára. A felső kritikus dimenzió alatt (6) a hőmérséklet kiskálázható: így az ultrametrikus rendparaméter perturbatív vizsgálata is lehetséges abban a tartományban, ahol a kritikus fixpont nemtriviális. A perturbációs sorfejtési paraméter a Parisi-féle rendparaméter-függvény töréspontja (x_1), ami egy nyilvánvalóan nemuniverzális mennyiség. Az említett szabadenergia-funkcionál valójában egy sorfejtés a replikaszimmetrikus állapot körül. A sorfejtési együtthatók a replikaszimmetrikus vertexek, ezek közül csak a köbös vertexekre léteztek elsőrendű perturbatív eredmények. A csoport egy tagja az év során a negyedrendű vertexek perturbatív korrekcióját is kiszámolta, a kapott eredmény lényeges információt szolgáltat az infravörös divergenciákkal kapcsolatban.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A csoport tagjai évek óta előadásokat tartanak az ELTE Fizikai Intézetének „Az atomoktól a csillagokig” című tudományt népszerűsítő sorozatában. A csoport egy tagja több ismeretterjesztő előadást is tartott a társadalmat erősen foglalkoztató klímakutatással kapcsolatban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A csoport tagjai együttműködnek egy sor hazai kutatóhellyel (BME Fizikai Kémia Tsz., DE, MFA és KFKI RMKI). Az ELTE-n folyó oktatásban is mindenki részt vesz különböző elméleti fizikai tárgyú tantárgyak oktatásával. 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, és a CERN Svájcban, ICTP Olaszországban, Grenoble-i és Paris-Sud Egyetem és CEA-Saclay Franciaországban, Jagelló Egyetem Lengyelországban és EWHA Egyetem Koreában.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport három tagja témavezetőként vesz részt OTKA, valamint INSTANS ESF Research Networking Program pályázatokban. Résztvevőként többnyire mindenki szerepel különböző OTKA pályázatokban.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bajnok Z, Hegedus Á, Janik RA, Lukowski T: Five loop Konishi from AdS/CFT. Nucl. Phys. B, 827: 426-456 (2010)
2. Bajnok Z, el Deeb O: Form factors in the presence of integrable defects. Nucl. Phys. B, 832: 500-519 (2010)
3. Ahn C, Bajnok Z, Bombardelli D, Nepomechie RI: Finite-size effect for four-loop Konishi of the beta-deformed N=4 SYM. Phys. Lett. B, 693: 380-385 (2010)
4. Takács G: Form factor perturbation theory from finite volume. Nucl. Phys. B, 825: 466-481 (2010)
5. Pozsgay B, Takács G: Form factor expansion for thermal correlators. J. Stat. Mech. P11012 (2010)
6. Györgyi G, Moloney NR, Ozogány K, Rácz Z, Droz M: Renormalization-group theory for finite-size scaling in extreme statistics. Phys. Rev. E, 81: 041135 (2010)
7. González-Cabrera DL, Rácz Z, van Wijland F: Casimir effect in the nonequilibrium steady state of a quantum chain. Phys. Rev. A, 81: 052512 (2010)
8. Temesvari T: The Ising spin glass in finite dimensions: A perturbative study of the free energy. Nucl. Phys. B, 829:(3) 534-554 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	6	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			13
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 13
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 8
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	30,39	Összes független hivatkozás száma:	163
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	182		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			4
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			7
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	3

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		34,4	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	13,5 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	8,1	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	5,4 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

ELTE FEHÉRJEMODELLEZŐ KUTATÓCSOPORT

Perczel András, az MTA levelező tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: 1-372 2500; fax: 1-372 2592
e-mail: perczel@chem.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Nagyműszeres kísérleti módszerekkel, és kvantumkémiai számításokkal jellemezték gyakorlati szempontból is érdekes fehérjék (pl. immunrendszer, cukorbetegség, jelátvitel) és építőköveik szerkezetét, dinamikáját és kölcsönhatásait. Új, potenciálisan biológiailag aktív kismolekulák szintézisét tervezték és valósították meg, elsősorban új típusú heterociklusos származékok és fémorganikus vegyületek körében. A szerkezeteket komplex nagyműszeres módszerekkel derítették fel és az eredményeket kvantumkémiai számításokkal támasztották alá.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Biopolimerek építőelemeinek szerkezete és kölcsönhatásai, és kapcsolódó szoftverfejlesztés.

Fehérjemotívumok és evolúciójuk kapcsolatát elemezve kimutatták, hogy coiled coil szegmenseket sok program gyakran rendezetlennek jósol, míg ez megfordítva nem igaz, és a mindkét típusú motívumnak jósolt szakaszok aminosav eloszlása az újonnan azonosított magányos töltött alfa-hélixekére emlékeztet (FEBS Lett). Elvégezték három gombaölő hatású oligopeptid konformációs vizsgálatát ECD-spektrumok analízisével [1]. Az ECD spektroszkópia területén új segédprogram készült a CCA+ programhoz, ami azokban az esetekben alkalmazható, ha a megmérhető bázis spektrumok nem fedik le a vizsgált molekulacsalád teljes konformációs terét (www.chem.elte.hu/departments/protnmr/cca).

Az amiloidképződés hajtóerejének felderítése céljából *in silico* vizsgálatokat végeznek a β -rétegek szerkezeti és energetikai jellemzőinek meghatározása. Ehhez Java-ban írt keretrendszert készítettek, melynek feladata a nem homológ fehérjékből álló adatbázisok karbantartása. Kifejlesztettek egy Java rutinkönyvtárat, amivel a kötőhossz, kötőszög és torziószög meghatározás mellett molekulaillesztő, hidrogénhíd analízis, vibrációs és NMR adatok feldolgozása is elérhető (Databases in QC és CtB2010 konferenciák). A β -rétegek vízmolekulák által kiváltott letékeredése kvantumkémiai vizsgálatának eredményeként különböző mechanizmust kaptak a paralel és antiparalel rétegek esetén. A paralel redő esetén már egy vízmolekula destabilizáló hatása is a redő cipzár-szerű felbomlásához vezet (J Phys Chem Lett). A β -peptidek szerkezetének és stabilitásának kvantumkémiai elemzése során új, redőzött réteghez hasonló konformereket fedeztek fel, amelyek gyakorlati alkalmazása, hogy nagy β -rétegek és biokompatibilis nanoanyagok kifejlesztésének kiindulópontjai lehetnek [2]. A kollagén első hidrációs rétegében kötődő vízmolekulák kötődési stabilitását szintén kvantumkémiai számításokkal vizsgálták, és energiavesztés nélkül elmozdítható vízmolekulákat azonosítottak, ami a tropokollagén egyes tulajdonságait jól magyarázza [3].

Potenciálisan biológiailag aktív molekulák szintézise és vizsgálata.

Új, hatástani szempontból is ígéretes 4-ferrocenil-dihidropirimidin és hexahidro-4-ferrocenil-2-tioxokinazolin származékokat állítottak elő formilferrocénből, 1,3-dioxovegyületek és tiokarbamid reakciójával. A reakciókból szimmetrikus 9-ferrocenil-xanténdionokat és – új gyűrűrendszerek első képviselőiként – triciklusos 9-ferrocenil-ciklopenta[*b*]kromenonokat is izoláltak. E termékek a ferrocénből származó ciklopentadién és a Knoevenagel kondenzációval képződő enon intermedier inverz elektronigényes oxa-Diels-Alder reakciójából származnak. A reakció mechanizmusát preparatív kísérletekkel és kvantumkémiai számításokkal igazolták [4].

Tanulmányozták benzotiazepin származékok dezmotrópiáját. A gyűrűtranszformációval előállított célvegyületek szerkezetét IR- és multinukleáris NMR spektroszkópiával tisztázták [5]. Tanulmányozták 1,3-benzotiazinok és 1,4-benzo-tiazepinek reakcióját dimetil-acetilén-

dikarboxiláttal és a képződött új triciklusos kondenzált heterociklusok szerkezetét röntgenkristallográfiával, IR- és NMR spektroszkópiával bizonyították [6]. A szegedi-gyulai kutatócsoportban előállított potenciálisan farmakológiailag aktív 1,3-benzotiazin-szulfonok szerkezetét komplex spektroszkópiai vizsgálatokkal igazolták [7].

Foszfinsav és foszfinsav-észter csoportot tartalmazó királis és akirális koronaéterek vizsgálata során ECD spektrumok számolásával bizonyították, hogy az akirális molekula kristályszerkezetében található dimer már hígabb oldatban is jelen van (Struct Chem).

A fehérjefunkció szerkezeti és dinamikai vonatkozásai.

Korszerű szerkezetszámoló módszerek segítségével különböző fehérjék olyan konformer családjait állították elő, amelyek tükrözik a molekulák adott időskálájú belső dinamikáját. Ezekre a kutatócsoport munkatársai által javasolt dinamikus szerkezet-hatás összefüggés-vizsgálatokhoz volt szükség [8]. Elkészítették a *CoNSEnsX* webes alkalmazást, amely kifejezetten ilyen sokaságok elemzésére alkalmas (consensx.chem.elte.hu). A kisméretű szerinproteáz-inhibitorok esetében eredményeik nanoszekundum időskálán lejátszódó konformer szelekcióra utalnak, finomítva az ezen inhibitorok működését magyarázó, jelenleg elterjedt merev kulcs-zár elméletet [9].

Az NMR módszerekkel jellemezték az Exendin-4, a kettes típusú cukorbetegség kezelésében alkalmazott polipeptid gyógyszer szerkezetét és dinamikai sajátosságait. Kimutatták, hogy az N-terminális szakasz rendezetlensége a jelentős szubnanoszekundumos belső mozgékonyaságnak a következménye (CtB2010 és a Foldamers2010 konferenciák). A veleszületett immunitásban erősen szabályozott szerin proteáznak, a C1r CCP1 és CCP2 moduljainak vizsgálták a dinamikáját és kölcsönhatásait független és kovalensen kötött CCP1-CCP2 felhasználásával NMR-rel. A CCP1 kapcsolódási pontot jelenthet más molekulák számára. Kísérletes és dokkolási adatok révén új lehetséges CCP1/CCP2 kölcsönhatási módot találtak, aminek a C1r működésekor bekövetkező nagymértékű elmozdulásakor lehet szerepe ([10]; Febs Lett). Megoldották az esszenciális kalcium szenzor fehérje, a kalmodulin kristályszerkezetét komplexben a szfingozil-foszforil-kolinnal, ami a kalmodulin természetes lipid mediátora. A szerkezet hozzájárult a kalmodulin szfingolipid micellákhoz való kötődése kétlépéses mechanizmusának megértéséhez [11]. A dUTPázok a genom integritás megőrzése szempontjából esszenciálisak. Az I. Motívumban található konzervált Asp szerepének vizsgálata során az Asp/Asn mutáns enzim kristályszerkezete igazolta, hogy ez az aminosav az alegységeket összetartó kölcsönhatásokban játszik szerepet, és nem a Mg^{2+} kötésben, amint azt korábban gondolták (Febs Lett). A szubsztrát uracil részével aromás kölcsönhatást létesítő aminosavnak a katalitikus mechanizmusban betöltött szerepét is vizsgálták. A meghatározott dUTPáz mutáns szerkezetek hozzájárultak annak a megértéséhez, hogy a konzervált aromás aminosav hogyan járul hozzá az enzimreakció átmeneti állapotának stabilizálásához [12].

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az ELTE Biokémiai Tanszékével és az MTA Enzimológiai Intézettel közösen megalapították az „Open Laboratory of Protein Science” szervezetet, a magyarországi fehérjetudomány egy nyílt fórumát. A nyitórendezvény kapcsán a kutatócsoportban alkalmazott vizsgálati módszereket bemutató ismeretterjesztő kisfilmet tesznek közzé az interneten.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Belföldi kapcsolatok: ELTE Biokémiai Tanszék (fehérjemotívumok evolúciója); SZTE Gyógyszerkémiai Intézete, Gyulai Megyei Kórház (benzotiazepin származékok); a BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszéke, MTA Kémiai Kutatóközpont Szerkezet Kémiai Intézete, MTA Alkaloid Kémiai Kutatócsoport (koronaéterek); MTA Enzimológiai Intézet Szerkezeti Biofizika (C1r), Genom Metabolizmus (dUTPáz), Lizofoszfolipid Receptorok csoportjai (kalmodulin).

Külföldi kapcsolatok: kolozsvári Babes-Bolyai Egyetem Szerves Kémiai Tanszéke; argentin San Luis-i Nemzeti Egyetem Kémiai, Biokémiai és Gyógyszerészeti Kara (gombaölő hatású peptidek); a Sussex-i Egyetem Kémiai és biokémiai Tanszéke (kulcs-zár mechanizmus); a

dániai Århus Egyetem (β -szerkezetek). Új együttműködés: szlovén NMR centrum. Az Universitat Autònoma de Barcelona munkatársa 3 hónapig elméleti számításokat végzett a kutatócsoportban.

A kutatócsoport tagjai kötelező és speciális kollégiumok, valamint gyakorlatok tartásával részt vesznek az ELTE vegyész, biológia és kémia BSc és MSc ill. PhD képzésben. A kutatócsoport vezetése alatt dolgozik 15 diákkörös és 5 PhD hallgató.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OKTA pályázatok, amelyekben a kutatócsoport tagjai vezetők: fehérje feltekeredés (K72973), oligopeptidázok (NK67800), ferrocénszármazékok és heterociklusok (K68887), immunrendszer fehérjéi (F67937), királis koronaéterek (PD71817); résztvevők: (NI68466, NK67800). A TÁMOP-4.2.1.B-09/1/KMR EU pályázatból történt egy 700MHz NMR készülék beszerzése, ami a kutatócsoport további kutatásai szempontjából nagy jelentőségű. Nemzetközi pályázatok az EU EAST-NMR(228461), COST CM0803 és a CPR-ICGEB ICGEB09-03 pályázatai.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Olivella MS, Rodriguez AM, Zacchino SA, Somlai Cs, Penke B, Farkas V, Perczel A, Enriz RD: New antifungal peptides. *Bioorg. Med. Chem. Lett*, 20: 4808-4811 (2010)
2. Pohl G, Beke T, Csizmadia IG, Perczel A Extended apolar beta-peptide foldamers: the role of axis chirality on beta-peptide sheet stability. *J. Phys. Chem. B*, 114: 9338-9348 (2010)
3. Pálfi KV, Perczel A: Stability of the Hydration Layer of Tropocollagen: A QM Study. *J. Comput. Chem.*, 31: 764-777 (2010)
4. Kiss K, Csámpai A, Sohár P: New ferrocenyl-substituted heterocycles. Formation under Biginelli conditions, DFT modelling and structure determination. *J. Organ. Chem.*, 695:1852-1857 (2010)
5. Csomós P, Fodor L, Csámpai A, Sohár P: Exceptional isolation of both imine and enamine desmotropes of 4,1-benzothiazepines. *Tetrahedron*, 66: 3207–3213 (2010)
6. Fodor L, Csomós P, Bernáth G, Sohár P, Holczbauer T, Kálmán A: Reactions of 1,3-benzothiazines and 1,4-benzothiazepines with dimethyl acetylene-dicarboxylate. *Mon. Chem*, 141:431-436 (2010)
7. Fodor L, Csomós P, Csámpai A, Sohár P: Staudinger and retro-Staudinger reactions. *Tetrahedron Lett.*, 51: 3205-3207 (2010)
8. Gáspári Z, Perczel A: Protein dynamics as reported by NMR. (szerk.: Graham Webb) *Academic Press Annu. Rep. NMR*, 71: 35-75 (2010)
9. Gáspári Z, Várnai P, Szappanos B, Perczel A: Reconciling the lock-and-key and dynamic views of canonical serine protease inhibitor action. *FEBS Lett.*, 584: 203-206 (2010)
10. Láng A, Szilágyi K, Major B, Gál P, Závodszy P, Perczel A: Intermodule cooperativity in the structure and dynamics of consecutive complement control modules in human C1r. *FEBS J.*, 277: 3986-3998 (2010)
11. Kovács E, Harmat V, Tóth J, Vértessy BG, Módos K, Kardos J, Liliom K: Structure and mechanism of calmodulin binding to a signaling sphingolipid reveal new aspects of lipid-protein interactions. *FASEB J.*, 24: 3829-3839 (2010)
12. Pécsi I, Leveles I, Harmat V, Vértessy BG, Tóth J: Aromatic stacking between nucleobase and enzyme promotes phosphate ester hydrolysis in dUTPase. *Nucl. Acids. Res.*, 38:7179-7186 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	3	Ebből kutató ² :	3
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			2
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			27
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			21
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	19
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	19
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	64,85	Összes független hivatkozás száma:	108
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	158		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			4
	posztterek száma:		6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		13,9	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	25,3
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			6
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	25,3	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			2
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	6,9
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3,3
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0

ELTE GEOLÓGIAI, GEOFIZIKAI ÉS ÚRTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Haas János, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány sétány 1/c
telefon: 1-381 2127; fax 1-381 2128
e-mail: haas@ludens.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatócsoport a Pannon-medence és a környező régiók geológiai felépítésének és szerkezetének megismerése céljából rétegtani, szedimentológiai és tektonikai kutatásokat végzett. Vizsgálták a földi hőtranszport folyamatok törvényszerűségeit, a köpenyben zajló termikus konvekciót, amely meghatározza a hőmérséklet eloszlását a Föld belsejében és a litoszférában. A hőtranszport folyamatok tanulmányozásával járultak hozzá Magyarország geotermikus viszonyainak jobb megismeréséhez, a kitermelhető geotermikus energia mennyiségének meghatározásához. Műholdas adatsorokon geokockázatot meghatározó, azzal összefüggő tényezők nyomon követése céljából módszerfejlesztés folyt.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az év folyamán nyomtatásban megjelent és dombortérkép formájában is kiadásra került Magyarország új medencealjzat térképe. A számos intézmény (Magyar Állami Földtani Intézet, MOL Nyrt., egyetemek) szakembereinek közreműködésével készült térképmű szerkesztését a kutatócsoport vezetője koordinálta. Az év végén Pozsonyban megjelent a Pannon-medence és azt körülölelő alpi–kárpáti–dinári hegységvonulatok térrénum térképeihez kapcsolódó monográfia, amelynek elkészítésében a kutatócsoport több tagja szerzői és koordináló feladatot végzett. A teljes régió triász és a jura képződményeit átfogóan bemutató tanulmányok közreadása folyamatban van az Osztrák Földtani Intézetben.

Lezárult az észak-magyarországi triász és jura képződmények rétegtani, szedimentológiai, tektonikai kutatásával kapcsolatos OTKA program. Jelentős új eredmény a Rudabányai-hegység és a Bükk jura lejtőüledékeiben lévő vulkanittörmelék korának radiometrikus módszerrel való meghatározása. Összefoglaló tanulmány készült a program eredményeiről és az új eredményeket bemutatták a Kárpát-Balkán Geológiai Asszociáció Szalonikiben rendezett kongresszusán is. Új kutatási projekt keretében vizsgálták a takarómozgásokkal összefüggésben álló folyadékaramlásokat az Aggteleki valamint a Szlovák Karszt területén. A deformáció közben nőtt ásványokon végzett folyadékzárvány vizsgálatok információt adtak a takarók áttolódásának hőmérsékleti és nyomás viszonyairól. Összefoglaló tanulmány készítésével zárták le a Pilis-hegység triász karbonátos képződményeinek OTKA program keretében folyt vizsgálatát. Megkezdődtek a Dunántúli-középhegység dolomit kőzetfajtáinak kutatását célzó, az év folyamán indult OTKA program terepi munkálatai.

A Radiometriai Laboratóriumban folytatódtak az urán-soros kormeghatározások. A Dunántúli-középhegység kiemelkedési sebességének barlangi kalcitlemezek kormérésén alapuló vizsgálatát kiterjesztették a budai termálkarsztról a Pilis-hegységre, ahonnan korábban nem volt az emelkedés ütemére vonatkozó konkrét mérési eredmény. Új gyártású ²²⁹Th oldat beszerzésével lehetőség nyílt az urán-soros kormeghatározáshoz alapvetően szükséges új nyomjelző elkészítésére. Az elvégzett tesztek alapján bizonyították, hogy a kormeghatározás bizonytalanságát sikerült jelentős mértékben leszorítani.

Üregkutatási célú szeizmikus és geoelektromos méréseket végeztek a budai Molnár János barlang melletti táróban és a dél-bükki Odor-vár mellett.

Vizsgálták a földi hőtranszport folyamatok törvényszerűségeit. A Föld egészére vonatkozóan a legfontosabb hőtranszport folyamat a köpenyben zajló termikus konvekció, amely

meghatározza a hőmérséklet eloszlását a Föld belsejében és a legkülső, szilárdnak tekintett héjában, a litoszférában, irányítja a litoszféra lemezek mozgását és felelős a tektonikai folyamatok kialakulásáért is. A termikus konvekció numerikus modellezésével különböző paraméterek, mint a belső hőtermelés, továbbá a viszkozitás mélység- és hőmérséklet-függésének tanulmányozása, valamint a köpenyben található fázisátalakulások hatásának vizsgálata volt a cél. A hőtranszport folyamatok tanulmányozása hozzájárult ahhoz is, hogy Magyarország geotermikus viszonyai jobban megismerhetők legyenek. Fontos cél a kitermelhető geotermikus energia mennyiségének a meghatározása, a kitermelés technológiájának, stratégiájának kidolgozása és a várható felszín alatti hőmérsékletváltozások előrejelzése.

A litoszféra hőmérsékleti és mechanikai tulajdonságainak modellezésével vizsgálták a mesterséges földhőrendszerek (EGS, Enhanced Geothermal Systems – kitermelő és visszasajtoló kutakból, valamint mesterséges rezervoárból álló geotermikus rendszerek) kialakításának lehetőségeit. A módszer, ami egy nemzetközi kutatócsoport többéves munkájának eredménye, a perspektivikus területek kijelölésére alkalmas. Az EGS rendszerek hozzájárulhatnak a világ energiaigényének kielégítéséhez, ami a fosszilis energiahordozók mennyiségének csökkenésével egyre nagyobb gondot fog okozni. Működő EGS ma még csak egy van a világon a Rajna-árokban. Működőképes és gazdaságos a technológia kialakításához további kutatások szükségesek, melyekhez az elméleti vizsgálatok az első lépést jelentik.

Folyamatosan részt vettek a geokockázati jelenségek globális monitorozását célzó orosz (IKI) Chibis mikro-műhold (tervezett felbocsajtás 2011. április) tudományos és technológiai előkészítésében. Megkezdték a rengési aktivitáshoz köthető anomalisztikus ELF-VLF jelenségek felismerését támogató automatikus eljárás fejlesztését. A 2010-ben lezárt, francia (CNES) DEMETER műholdas program regisztrátumainak tudományos feldolgozásában vettek részt. Terjedési modelleket dolgoztak ki a földi plazmakörnyezetben regisztrálható villamos jelek korábbanál pontosabb értelmezésére. Részt vettek a magyar koordinálású, globálisan telepített keskeny- és szélessávú (AWDANet) VLF földi űr-időjárás mérőhálózat továbbfejlesztésében. Ennek saját fejlesztésű jelfeldolgozó és elemző DSP egységei a technológiai élvonalat képviselik, széleskörű alkalmazásuk anyagi haszonnal és tudományos ranggal járó export.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A jelentős szerepet vállaltak a 2010 őszén a Magyar Természettudományi Múzeumban rendezett Földindulás című 4 napos tudományvásár jellegű bemutató szervezésében valamint a „Múlt ösvényein” című tudományos ismeretterjesztő könyv szerkesztésében. A nagyközönségnek is bemutatták Magyarország új medencealjzat térképét, amelyről több ismeretterjesztő közlemény is megjelent. Részt vállaltak a geotermikus energia hasznosításának lehetőségeinek, a felhasználás bővítésének bemutatásában, amely témakör élénken foglalkoztatja mind a hazai társadalmat, mind a gazdasági élet szereplőit. A kitermelő és visszasajtoló kútpárok felszín alatti vízáramlásra és geotermikus térre gyakorolt hatásának modellezése az egyik legfontosabb eszköz, hogy a kitermelt termásvíz, és vele a hőenergia mennyiségét tervezni és növelni lehessen.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatás, az oktatás és a továbbképzés területén aktív együttműködés folyt a MOL Nyrt-vel. Szoros volt a munkakapcsolat a Magyar Állami Földtani Intézettel, elsősorban földtani térképszervezési feladatok tekintetében, az MTA Geokémiai Kutatóintézettel, izotópgeokémiai és metamorfózis vizsgálatok területén, a Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézettel elsősorban paleomágneses és obszervatóriumi méréseket illetően. A

radiometriai labor rendszeres munkakapcsolatban állt az MTA Izotópkutató Intézet ICP-MS laboratóriumával. Konzorciális együttműködés keretében dolgoztak az MTA Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézettel, elsősorban a hullámterjedési, ELF-VLF vizsgálatok, az űr-időjárás kutatásában.

TÉT pályázat keretben osztrák, horvát, szlovák és lengyel partnerekkel működtek együtt geológiai és geofizikai kutatási témákban. A hullámterjedés és ELF-VLF vizsgálatok terén szoros együttműködésben voltak a következő kutatóhelyekkel: Izmiran (Oroszország); CNES és CNRS (Franciaország); Univ. of Natal, Durban (Dél-Afrika); British Antarctic Survey, Cambridge (UK); Univ. of Otago, Dunedin (Új-Zéland); Stanford Univ. (USA).

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az év folyamán indult a Dunántúli-középhegységi felső-perm és triász dolomitok összehasonlító vizsgálata témájú OTKA program. A projekt célja a különböző dolomitfajták sokoldalú vizsgálata az eredeti üledékösszetétel, a petrográfiai és a geokémiai jellemzők és a diagenetikus folyamatok nyomainak felismerése és a dolomitosodási folyamatok tisztázása érdekében. A dolomitok gyakorlati jelentősége is számottevő, hiszen a Dunántúli-középhegységi szerkezeti egységben karsztvíz és szénhidrogén tárolókőzetek és a dolomitok genetikája befolyásolja tárolási sajátosságait is.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Cloetingh S, van Wees JD, Ziegler P A, Lenkey L, Beekman F, Tesauro M, et al. (17): Lithosphere tectonics and thermo-mechanical properties: An integrated modelling approach for Enhanced Geothermal Systems exploration in Europe. (2010)
2. Earth-Science Reviews 102, 159–206 (2010)
3. Haas J, Budai T, Csontos L, Fodor L, Konrád Gy: Magyarország pre-kainozoos földtani térképe 1:500 000. MÁFI, Budapest (2010)
4. Haas J, Götz AE, Pálffy J: Late Triassic to Early Jurassic paleogeography and eustatic history in the NW Tethyan realm: New insights from sedimentary and organic facies of the Csővár Basin (Hungary) Palaeogeogr., Palaeoclimat., Palaeoecol. 291: 456-468 (2010)
5. Hips K, Haas J, Vidó M, Barna Zs, Jovanović D, Sudar M, Siklósy Z: Selective blackening of bioclasts via mixing-zone aragonite neomorphism in Late Triassic limestone, Zlatibor Mountains, Serbia. Sedimentology (2010) doi: 10.1111/j.1365-3091.2010.011186.x
6. Haas J, Pelikán P, Görög Á, Ozsvárt P, Józsa S, Kövérsz Sz: Subduction related Jurassic gravity deposits in Bükk-Darnó area, Northeast Hungary. Proceedings 19th Congress of the CBGA, Thessaloniki, Greece, 149-156 (2010)
7. Lichtenberger J, Ferencz Cs, Hamar D, Steinbach P, Rodger CJ, Clilverd MA, Collier AB: Automatic Whistler Detector and Analyzer system: Implementation of the analyzer algorithm. Journal of Geophysical Research-Space Physics, 115: A12214 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	6	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	40		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :	35		
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban magyarul:	1	idegen nyelven:	1
külföldi folyóiratban magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Ebből impaktfakt. publ, térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	6
Könyv ⁸ magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹ magyarul:	0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	21,63	Összes független hivatkozás száma:	133
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	141		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :	6		
	posztterek száma:	7	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :	7		
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	10
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	2

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	25,9	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	11,3 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	11,3	MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt	
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

ELTE PEPTIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Hudecz Ferenc, az MTA levelező tagja
1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/A.; 1518 Budapest, Pf.32.
telefon: 1-372 2828; fax: 1-372 2620
e-mail: fhudecz@ludens.elte.hu; honlap: <http://peptid.chem.elte.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Biológiailag aktív peptidek és peptid konjugátumok tervezése és szintézise, szerkezet-hatás vizsgálatok, terápiás alkalmazás és diagnosztikumok kifejlesztésének céljából. Nagy specifitású peptid-antigének illetve gyógyszerhatóanyagok kifejlesztése sokakat érintő betegségek (pl. rák, TBC, Alzheimer-kór, reumatoid arthritis) korai diagnózisa és/vagy gyógyítása céljából. A kutatási tevékenység három témakörre koncentrálnak:

- 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 *M. 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 hatékonynak bizonyult kismolekulák specifitásának növelése peptidkonjugátumaik előállításával.
- Immunkémiai kutatások: A fenti betegségekhez kapcsolódó fehérjékből (pl. mucin, glikoproteinek, filaggrin, béta-amiloid), származó és módosított mesterséges peptid alapú "szuperantigének" szintézise diagnosztika, és/vagy szintetikus vakcina kifejlesztése céljából.

Résztétel a felsőoktatásban (BSc, MSc és PhD) előadóként, gyakorlatvezetőként és témavezetőként, a tehetséggondozásban (TDK témavezetés), a természettudományos ismeretterjesztésben.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Új vinblasztin származékot tartalmazó oligoarginin peptid konjugátumcsaládot állítottak elő, amelyben a vinblasztin 16-os pozíciójában Trp-t tartalmaz. Felfedezték, hogy az Arg_n (n = 4, 6 vagy 8) kapcsolási reakció során két izomer keletkezik, amelyeket NMR spektroszkópiai módszerekkel azonosítottak. Megállapították, hogy a szenzitív illetve multidrog rezisztens HL-60 sejteken aktív konjugátumok hatása a peptidlánc hosszától jelentős mértékben függ. Megfigyelték, hogy a két izomer között lényeges különbség volt a tubulin polimerizációjára gyakorolt hatásban *in vitro* és *in vivo* egyaránt. Az L-Trp tartalmú konjugátum nagy szelektivitást mutatott a mitotikus orsóra gyakorolt hatásban.

Szintetizálták az oxim-kötést tartalmazó GnRH-III hormon daunomicin konjugátum GFLG spacer szakaszt tartalmazó variánsát. Összehasonlító vizsgálatokban bizonyították, hogy – szemben a szabad daunomicinnel – a konjugátumok nem toxikusan egészséges BDF-1 egereken *in vivo*. Kétféle tumor-sejtvonalon (MCF-7 emlő, HT-29 vastagbél) *in vitro* a két konjugátumot hatékonynak találták, az MCF-7 sejteken a hatás 5-7-szer erősebbnek bizonyult. HT-29 tumorban szenvedő egerek esetében 40 % illetve 50 %-os tumornövekedés gátlást lehetett elérni a kezelési protokoll függvényében.

Új daunomicin – elágazó lánccú polipeptid konjugátumokat állítottak elő. E vegyületekben kationos, anionos vagy amfoter, valamint oktaargininnel módosított polimer polipeptidhez kapcsolódik az antraciklin hatóanyag. A sejtbejutás mértékét humán (MonoMac6, HL-60) illetve egér (J774, L1210) sejtvonalakon, valamint egér csontvelő makrofágokon tanulmá-

nyozva megállapították, hogy a hordozó szerkezete döntő mértékben meghatározza a konjugátumok bejutását a sejtbe. Az oktaarginin jelenléte a konjugátumban jelentősen növelte a konjugált daunomicin sejtfelvételét.

A korábban előállított, *M. tuberculosis* H₃₇Rv tenyészetben hatékony T sejt építő peptiddel konjugált izoniazid (INH) transzportsajátságait vizsgálták különböző összetételű modell foszfolipid membrán monorétegeken többféle módszerrel (AFM mikroszkópia, tenziometria, vibráció spektroszkópia). Megállapították, hogy a szabad INH hatóanyaghoz képest a peptid konjugáció jelentősen megnöveli a membránon történő átjutás képességét.

Nemzetközi szabadalmakat kaptak az Alzheimer betegség korai diagnosza illetve terápiája céljából kidolgozott építő specifikus peptid – biokonjugátumokra vonatkozóan.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

2010-ben az MTA Kémiai Osztály nyilvános „Magyar tudomány nap” rendezvényen, valamint a Bruckner termi előadássorozat keretében 1-1 előadásra került sor, továbbá egy MTA székfoglaló előadásra hangzott el. Az ELTE 375 évfordulón, az ELTE-SOTE ünnepi konferencián ugyancsak elhangzott egy tudományos ismeretterjesztő előadás. Az ELTE nyilvános tudományos ismeretterjesztő programjai közül az „Alkimia ma” sorozatban két munkatárs tartott illetve tart előadást, 2010-ben a fordított TDK rendezvényen három előadásra került sor. Az ELTE Innovációs napján rendszeresen részt vesz a csoport, a tárgyévben öt posztert mutattak be. Ezen kívül rádió- illetve TV megkereséseknek tettek eleget. A csoportból hárman vettek részt kutatási pályázatok (OTKA, NKTH, ETT) bírálatában. A csoport magyar és angol honlapja szintén segíti a párbeszédet.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Közös publikációval, kutatási projekttel dokumentált, élő hazai kapcsolatok: ELTE Szerves Kémiai Tanszék, Fizikai Kémiai Tanszék, Immunológiai Tanszék, Analitikai Kémiai Tanszék; Matematikai Tanszék; BME, Szerves Kémiai Tanszék; SE Biofizikai és Sugár-egészségügyi Intézet, Bőr-, Nemikórtani és Bőronkológiai Klinika, Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézet, 1.sz. Gyermekgyógyászati Klinika, Országos Onkológiai Intézet; Országos Korányi TBC és Pulmonológiai Intézet, MTA Kémiai Kutatóközpont; MTA KOKI, MTA SZBK Biokémiai Intézet, Enzimológiai Intézet; ORFI; Fővárosi Önkormányzat Uzsoki utcai Kórház, Metrimed Kft, Soft Flow Hungary Kft, Servier Research Institute of Medicinal Chemistry, Richter G. Vegyészeti Gyár Rt.

Közös publikációval, kutatási projekttel dokumentált, élő nemzetközi kapcsolatok: Department of Experimental and Health Sciences, Pompeu Fabra University, Barcelona, Spain; Cell Biology, Purpan Medical School, Toulouse III University, France, Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, Konstanz University, Germany; Institute of Chemistry, University of Graz, Austria; Department of Inorganic and Organic Chemistry, Charles University, Prague, The Czech Republic; Institute of Biochemistry, CNR, Napoli, Italy; Faculty of Health Sciences, University of Cape Town, South Africa; Philips Research Laboratories, Aachen, Germany.

Tudományos célú utazások: konferencia kiutazások, valamint a kétoldalú közös kutatások folytatását célzó rövid tanulmányutak (1 hét – 1 hónap). A kutatócsoport hat tagja, összesen kilenc alkalommal utazott külföldre (Spanyolország, Olaszország, Franciaország, Németország). Vendégkutatóként a csoportban hét látogatót (MIT, Cambridge, USA; Institute of Protein Research, CNR, Napoli, Italy; University of Konstanz, Konstanz, Germany) fogadtak 1-3 hét időtartamra. A csoport nyolc tagja mutatta be eredményeit hat nemzetközi konferencián (31st European Peptide Symposium, Denmark, 30th European Workshop for Rheumatology Research, Germany), 3rd International Nano Bio Conference

2010, Zürich, Switzerland, 5th International Peptide Symposium, Japan, International Conference on Antimicrobial Research, Spain).

Oktatás: PhD témavezetés (8 fő, ebből 2 fő védett), diploma-témavezetés (11 fő), tudományos diákköri (TDK) témavezetés dolgozattal (2 fő). Fő- és speciális kollégiumok, gyakorlatvezetés (biológus BSc, kémia BSc, vegyész MSc, környezettudomány BSc), PhD előadásorozatok, TDK dolgozat/szakdolgozat/PhD dolgozat bírálata, vizsgáztatás. Előadások tanár továbbképzés keretében. ERASMUS Oktatói és Hallgatói Mobilitás (Konstanz University, Helsinki University).

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Egy új NKTH - ANR francia-magyar közös (témavezető) kutatási, valamint egy OTKA program (közreműködő) indult, autoimmun betegségek diagnosztikája és terápiája témakörben. Egy új OTKA program foglalkozik sejtpenetráló peptid-konjugátumok kutatásával (témavezető). További két OTKA által támogatott program kezdődött el a tumorelles szerek és diagnosztikumok terén (mindkettőben közreműködő). A csoport részt vesz az ELTE TÁMOP kutatóegyetemi program megvalósításában (peptidkémiai kutatások). Egy ismételt elnyert NKTH-TÉT (magyar-dél-afrikai) program keretében *M. tuberculosis* korai kimutatására alkalmas peptidekkel foglalkoznak (témavezető). Egy új MTA-CNR programban tumorelles peptid konjugátumok hatását elemzik proteomikai módszerekkel (témavezető). Három OTKA programban és egy ETT programban (témavezető) folytatódott a kutatás (tumorelles hatóanyagok célbajuttatása, *M. tuberculosis* ellenszerek témakörökben). További egy OTKA-programban (neuropeptidek) folyik az együttműködés (közreműködő). Ugyancsak folytatódott a munka az NKTH (Jedlik) kutatásban *M. tuberculosis* ellenszerek vonatkozásában (közreműködő) és egy TÉT program keretében a Magyar-Spanyol (témavezető).

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bánóczy Z, Gorka-Kereskényi Á, Reményi J, Orbán E, Hazai L, Tikési N, Oláh J, Ovádi J, Béni Z, Háda V, Szántay Jr. Cs, Hudecz F, Kalas Gy, Szántay Cs: Synthesis and in vitro antitumor effect of vinblastine derivative-oligoarginine conjugates. *Bioconjugate Chemistry*, 21: 1948-1955 (2010)
2. Bojnik E, Babos F, Magyar A, Borsodi A, Benyhe S: Bioinformatic and biochemical studies on the phylogenetic variability of proenkephalin-derived octapeptides. *Neuroscience*, 165 :542-552 (2010)
3. Hill K, Péntes CsB, Schnöller D, Horváti K, Bősze Sz, Hudecz F, Keszthelyi T, Kiss É: Characterisation of the membrane affinity of an isoniazide peptide conjugate by tensiometry, atomic force microscopy and sum-frequency vibrational spectroscopy, using a phospholipid Langmuir monolayer model. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 12:11498-506 (2010)
4. Mező G, Manea M: Receptor-mediated tumor targeting based on peptide hormones. *Expert Opin. Drug Deliv.*, 7: 79-96 (2010)
5. Szabó R, Bánóczy Z, Mező G, Láng O, Köhidai L, Hudecz F: Daunomycin-polypeptide conjugates with antitumor activity. *Biochim.Biophys Acta*, 1798: 2209-2216 (2010)
6. Przybylski M, Manea M, Hudecz F, Mező G: Bioconjugates comprising A.beta.-autoantibody-specific epitopes for active immunotherapy and diagnosis of Alzheimer's disease. *Eur. Pat. Appl.* (2010), EP 2143447, PCT Int. Appl. WO 2010003691 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	9	Ebből kutató ² :	8
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			24
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			24
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 1	idegen nyelven:	23
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	23
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	22
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	18
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	55,23	Összes független hivatkozás száma:	248
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	333		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	2	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	2
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			5
		posztterek száma:	25
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	3		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		31,7	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	119,6
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			7
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		28,3	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			7
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	40,5
Egyéb:	6	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	48,9
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			1,9

ELTE STATISZTIKUS ÉS BIOLÓGIAI FIZIKA KUTATÓCSOPORT

Vicsek Tamás, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1 A
telefon: 1-372 2795; fax: 1-372 2757
e-mail: vicsek@hal.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A 2010 évi feladatok egyfelől a korábban megkezdett kutatások eredményeinek fontos nemzetközi folyóiratokban való publikálása, és az esetenként hozzájuk társuló programcsomagok fejlesztése voltak. A kutatócsoport tagjai aktívan részt kívántak vállalni az ELTE Fizika szak oktatási tevékenységében, amelyet sikerrel teljesítettek. 2009-ben több új projekt indult be, és cél volt, hogy ezek eredményeiből már 2010-ben cikkek szülessenek. Ezt a célt elérték, sőt, túlteljesítették, mert a publikációk egy része a legrangosabb folyóiratokban jelent meg. Az egyik a *Nature* címlapjára került, a másik fontos munka az Amerikai Tudományos Akadémia folyóiratában (*PNAS*) jelent meg.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A postagalambok egy raja előtt az a feladat áll, hogy minél hamarabb, minél rövidebb úton térjenek haza. A megoldandó probléma összetett, a korábbi kutatások szerint a galambok nem rendelkeznek abszolút pontos iránytűvel, hanem sokkal inkább egy komplex, több komponensből álló információs bázisra támaszkodnak, amikor a hazavezető útvonalat kiválasztják. A kutatócsoport tagjai által kifejlesztett, ultra-könnyű, a repülés adatait a másodperc töredékének gyakoriságával rögzítő GPS berendezések memóriájának kiolvasása után a kutatók egy gazdag, dinamikusan változó, a vezetési szerepeket tekintve hierarchikus követési viszonyokat tükröző kollektív döntéshozatali mechanizmust tártak fel. Az egymás repülési teljesítményeit ismerő (huzamosabban egy galambdúcban élő, és rendszeresen együtt repülő) galambok között voltak egymás alá rendelt, következetesen a saját útvonalukhoz ragaszkodó vezéregyenységek, és az általuk meghatározott irányt statisztikailag jól igazoltan követő galambok. Mindezt rendkívül jól szemlélteti a kutatócsoport által a mérési adatok alapján készített animációs video (<http://hal.elte.hu/pigeonflocks>).

A hálózatok több szintű, hierarchikus szerkezetének tanulmányozása során egy általános véletlen gráf generáló módszer került bevezetésre. A modell segítségével legyártott hálózatban a csomópontok összekötöttségi valószínűségét egy önazonos, hierarchikus mérték adja meg. Az iteráció előrehaladtával így egy egyre összetettebb, hierarchikus struktúra áll elő, ami megfelel egy multifraktálnak. A generáló mérték változtatásával nagyon sokféle véletlen hálózat állítható elő, pl. megadható, hogy az egyes csúcsokhoz kapcsolódó kapcsolatok száma milyen eloszlást kövessen. De szinte tetszőleges más hálózati tulajdonság, vagy akár több tulajdonság párhuzamosan is megadható, és az algoritmus ezekre optimalizált véletlenszerű, hierarchikus hálózatot fog generálni.

Az ELTE-n és a SE-n dolgozó kollégákkal együttműködve létrehozták a Signalink nevű jelátviteli adatbázist (<http://Signalink.org>) amely 8 kulcsfontosságú jelátviteli útvonal hálózat-térképét tartalmazza három szervezetben: *C. elegans*, *D. melanogaster* és *H. sapiens*. A végzett kézi gyűjtés („manual curation”) dokumentált és egyenletes részletességű, 170

összefoglaló és kb. 800 kutatási cikk összesítésével történt. Eredményeik szerint emberi sejtekben a nyolc útvonal közül bármelyik kettő között van jelátviteli kölcsönhatás („cross-talk”). Szintén a jelátviteli útvonalakkal kapcsolatos eredmény egy felhasználóbarát bioinformatikai szerver létrehozása a <http://PathwayLinker.org> web címen. A PathwayLinker szerver a molekuláris biológiai kísérleteket végző kutatók számára nyújt segítséget.

A részecskefizikához kapcsolódó két témakörben eredményeket értek el: az ún. nagy- n kifejtésen alapuló nem-perturbatív megoldás konstrukciója az $U(n) \times U(n)$ szimmetriájú mezon modellben, illetve a QCD kritikus és trikritikus pontjainak effektív modellbeli vizsgálatában. Az elért eredményeket az év folyamán három publikáció formájában közölték a Physical Review D folyóiratban ($IF > 5$). A mezonokból és konsztituens kvarkokból felépülő $SU(2)_L \times SU(2)_R$ királis kvark modellt a gluondinamikát modellező Polyakov hurok szabadsági fokkal terjesztették ki, és a flavor-szám szerinti kifejtés vezető rendjében megvizsgálták a véges hőmérsékleten és barionsűrűség esetén zajló királis és kvarkfelszabadító fázisátalakulások egymásra gyakorolt hatását. Meghatározták a bariokémiai potenciál – hőmérséklet síkbeli fázisdiagram kritikus végpontjának helyét a renormált perturbatív sor különböző végtelen rendű felösszegzésének alkalmazásával.

Green-függvényes technikával vizsgálták a superfolyékony Fermi-gázok gradiens korrekcióit csapdázott gázoknak a Cooper-jelenségről is számot adó általánosított Thomas-Fermi modelljében a Feshbach-rezonancia BCS-oldalán. A Feshbach ponton azt találták, hogy a lokális sűrűség közelítésen túli első el nem tűnő korrekció egy-egy univerzális, $7/27$ szorzójú, ún. von-Weizsacker típusú korrekcióval írható le. A gradiens korrekciók fontosak egyes problémák DFT számolása során. Az irodalomban empirikusan a legjobb közelítést akkor kapták, amikor a von-Weizsacker típusú korrekció együtthatóját $1/4$ körülire választották. Ez numerikusan közel van az előbbi származtatott $7/27$ értékhez.

Korábban kidolgozott, innovatív megoldásokat tartalmazó mini-inkubátorokra vonatkozó szabadalmi igényüket a hivatal megadta: A találmány címe: Eljárás és inkubátor élő sejtek mikroszkópos megfigyeléséhez. A bejelentés napja: 2007. május 22. A szabadalom lajstromszáma: 227211

Egy kutatójuk 2010 folyamán sikerrel megvédte "Csapdázott ultrahideg gázok gerjesztéseinek vizsgálata" című MTA doktori értekezését.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai aktív részt vállaltak a tudományos ismeretterjesztés területén. Részt vettek a Kutató Diák mozgalomban, előadásokat tartottak több gimnáziumban. Rádió és TV interjúkat adtak legújabb eredményeikről (egyik munkájukról a Discovery Canada műsort készített). A kutatási eredmények felhasználását segítő, a korábban kifejlesztett CFinder szoftverhez folyamatos szoftver-támogatást ad a csoport. Az idei évtől egy publikus, online felületen is kipróbálható a CFinder. Az e-mailes megkeresések alapján a szoftvert a legkülönbözőbb területeken használják, úgymint diák projektek, biológiai és társadalomtudományi elemzések, vagy akár terror-támadások elemzése is.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport szoros együttműködésben van több hazai és külföldi kutatóhellyel. A következőkben csak azok kerülnek felsorolásra, amelyek keretében publikáció is született, ill. készülóban van.

Hazai együttműködések:

Sejtbiológiai vonatkozású kutatások terén együttműködnek az MTA KOKI csoportjával, az MTA RMKI, a TEXTREND kutatói konzorcium tagjaival.

Nemzetközi együttműködések:

- Northeastern Univ., USA
- Háromoldalú kutatási együttműködést folytattak a Graz-i Karl Franzens Egyetem és a zágrábi Rudjer Boskovic Intézet, valamint a Zágrábi Egyetem kutatóival
- Los Alamos National Laboratory

A kutatócsoport 2010. márciusában 3 napos nemzetközi műhely-szemináriumot szervezett a kvantumtérelmélet nem-perturbatív megoldási módszereinek témakörében, „Non-Perturbative Methods in Quantum Field Theory” címmel. Egy tudományos munkatárs hosszabb vendégkutatói meghívást kapott az École Polytechnique (Franciaország) elméleti fizikai csoportjához.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai részt vesznek az ELTE által elnyert Társadalmi Megújulás Operatív Program pályázatban (TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR). A pályázatot a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség írta ki, az ELTE 3 milliárd forintot nyert a 2010. június 1. és 2012. május 31. között futó projektekre. A kutatócsoport tagjai az 1-es számú alprojektben „Nagy rendszerek a természettudományokban és számítógépes szimulációjuk” című, 36 M Ft támogatási keretű csoportprojektben vesznek részt.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Nagy M, Ákos Zs, Biro D, Vicsek T: Hierarchical group dynamics in pigeon flocks. *Nature*, 464: 890-893 (2010)
2. Palla G, Lovász L, Vicsek T: Multifractal network generator. *Nat. Acad. Sci. USA*, 107: 7640-7645 (2010)
3. Korcsmáros T, Farkas IJ, et. al.: Uniformly curated signaling pathways reveal tissue-specific cross-talks and support drug target discovery. *Bioinformatics*, 26: 2042-48 (2010)
4. Markó G, Szép Zs: Influence of the Polyakov loop on the chiral phase transition in the two flavor chiral quark model. *Phys. Rev. D*, 82: 065021 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	5	Ebből kutató ² :	5
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			22
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			17
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 15
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	96,86	Összes független hivatkozás száma:	1353
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1364		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	1
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	1	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			10
		posztterek száma:	5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	7	PhD:	6

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		29,1	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	105,5 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		11,2	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	11,2 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4,1 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		9,0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	70 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

ME ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Roósz András, az MTA rendes tagja
3515 Miskolc-Egyetemváros, Anyagtudományi Intézet
telefon: 46-565 111/1543; fax: 46-565 201
e-mail: femroosz@gold.uni-miskolc.hu; honlap: <http://www.matsci.uni-miskolc.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A pályázatban szereplő feladat:

- Tömbi rézalapú amorf fémek (finanszírozó: MTA)
- Anyagtudományi szimuláció (fiatal kutató feladata, finanszírozó: MTA)

A pályázaton kívüli munkák:

- Mágneses keverés hatása a kristályosodó szerkezetre (finanszírozó: MŰI, ESA)
- Nemesíthető rézötvözetek tulajdonságainak vizsgálata a hőkezelés függvényében (finanszírozó: Schmelzmetall Hungária Kft.)

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Réz alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása és fejlesztése

A Cu-Zr-Ag-Al ötvözetcsaládban az eddig publikált amorf anyagok likvidusz hőmérsékleteit összegyűjtve meghatározták, hogy közelítőleg hol lehet a kvaternér rendszer eutektikuma. Ezen adatok alapján több ötvözetet állítottak elő ívfényes olvasztással. Az Ag és Al tartalmat 12,5at%-ról 8%-ig csökkentették. A legjobb tömbi amorf képző képességgel rendelkező ötvözetnek a $\text{Cu}_{36}\text{Zr}_{48}\text{Ag}_8\text{Al}_8$ összetétel bizonyult. Már a mesterötvözetek is, amelyek viszonylag lassan hűltek, a röntgenes és mikroszkópos vizsgálatok alapján már 90%-ban amorfok voltak. A centrifugál öntéssel készült ékek teljesen amorfok. A lehetséges 5.ötvözőelem hatását a Ni, és Y esetén vizsgálták. Az 1-3at% Y ötvöző hatására monotektikusá vált az ötvözet, nagy Y tartalmú olvadék cseppek váltak ki az olvadékból, és nem lehetett amorf ötvözetet előállítani nagy hűtési sebesség esetén sem. Az 1-3at% Ni hatására nem javult az amorfizálható képesség, az ékek amorf+mikro kompozitok. Az ötvözetek termikus tulajdonságait meghatározták differenciál scanning kalorimetriával.

$\text{Cu}_{57.5}\text{Hf}_{27.5}\text{Ti}_{15}$ és $\text{Cu}_{49}\text{Hf}_{42}\text{Al}$ ötvözeteket is vizsgálták. A mintákat öntött, ill. DSC-ben izotermásan hőkezelt állapotban vizsgálták, ahol az amorf anyagból metastabil vagy stabil fázis kezd kristályosodni. Transzmissziós elektronmikroszkópos (TEM) vizsgálattal a $\text{Cu}_{57.5}\text{Hf}_{27.5}\text{Ti}_{15}$ ötvözetben öntött állapotban 3-10 nm méretű kristályokat találtak, amelyek amorf mátrixban helyezkedtek el, míg a hőkezelt mintákban HfO_2 és más kristályos fázisokat találtak, némi amorf rész mellett. A $\text{Cu}_{49}\text{Hf}_{42}\text{Al}$ ötvözetnél 7-12 nm nagyságú kristályokat találtak az öntött mintában. A hőkezelt mintában 20-40 nm-es szemcsék találhatók, nyomokban felfedezhető még amorf fázis is. A $\text{Cu}_{65}\text{Hf}_{20}\text{Ti}_{15}$ és $\text{Cu}_{60}\text{Hf}_{30}\text{Ti}_{10}$ ötvözetek ék formába öntés után még a legvékonyabb részekben is mutattak kristályos fázist. DTA mérésekkel megállapították az ötvözetek likvidusz és szolidusz hőmérsékletét. Mindkét összetétel esetében egy primér fázisnak a kristályosodása és egy eutektikus kristályosodás történik, amellyel befejeződik az olvadék átalakulása.

Másik tématerület keretein belül a korábbi munkák során létrehozott amorf por kompakt darabbá történő alakadását tüzték ki célul. A kutatócsoport először további kísérleteket folytatott a porok amorfizálásával. Az amorf-nanokompozit port további technikákkal vizsgálták. TEM segítségével láthatóvá vált, hogy egy szemcse nagyrészt amorf részből áll, amelyben helyenként 10-20nm-es kristályos területek, illetve 10nm-nél kisebb területeken rövid távú rendezettség figyelhető meg. A porok préselését és szinterelését a kutatócsoport

jelenleg a Miskolci Egyetemen végzi. Egyoldalú hidegsajtolással, többféle sajtoló nyomással kenőanyag nélkül sikerült darabokat előállítaniuk. 400 MPa-tól - 1 GPa nyomásig készítettek 14mm magas, 7 mm átmérőjű hengeres próbatesteket, szemben a korábbi 600 MPa-os (Krakkó) kísérletekkel.

Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre (finanszírozó ESA, MÜI)

Az Al-Ni eutektikus összetételű ötvözetek előállítására 99,99 tisztaságú alumínium és 10 tömeg % Ni-t tartalmazó Al-Ni segédötvözet felhasználásával történt. Az próbákat egy 4-zónás kemencével felszerelt kristályosító berendezésben irányított hőelvonással, a gravitációs térrel ellentétesen átkristályosították a függőleges Bridgman eljárás szerint forgó mágneses térben illetve mágneses tér nélkül különböző kristályosítási paraméterekkel. A kísérletek célja a kristályosodás közbeni forgó mágneses tér által keltett kényszer olvadáramlás hatásának vizsgálata volt a létrejött makro- és mikro-szerkezetre. A 10 mT-val kevert próba alján a Ni koncentráció lecsökkent, a kristályosodás alumínium szilárdoldat dendritekkel kezdődött. $l=45$ mm-nél a forgás irányával megegyező irányú, görbült primer cellahatárok találhatók, a próba közepén jól láthatók a szekunder cellahatárok is. Primer alumínium dendritek itt már nem kristályosodtak. A próba felső részén ($l=90$ mm) a görbült primer cellahatárok valamint a köztük levő szekunder cellahatárok a próba teljes felületén megjelentek.

Nemesíthető rézötvözetek tulajdonságainak vizsgálata a hőkezelés függvényében (finanszírozó: Schmelzmetall Hungária Kft.)

Az alapötvözet a Cu-Ni-Si-Cr, amelyhez Co-t, ill. az egyik ötvözetnél Nb-t és Zr-t is adagoltak az üzemben. A Jominy próbákat előre elkészített hőkezelési terv szerint hőkezelték. A hőkezelt minták palástja mentén Brinell keménység mérést és elektromos vezetőképesség mérést végeztek. Ezen mérések alapján megállapítható volt az egyes ötvözet típusok esetében az optimális hőkezelési hőmérséklet, valamint a hőkezelés optimális hossza, amivel a legnagyobb keménység és vezetőképesség elérhető. A kapott eredményeket a megrendelő cégnek már átadták.

Anyagtudományi szimuláció

Az ESTPHAD módszer fejlesztésének keretében elsősorban a likvidusz hőmérséklet számítására összpontosítottak. Foglalkoztak továbbá monotektikus rendszerek szétválási hőmérsékletének számításával. Számításokkal igazolták, hogy zárt maximummal kristályosodó szilárdoldat/vegyület esetében amennyiben ismert a vegyület, illetve a tiszta alkotó allotróp módosulatának metastabil olvadáspontja, akkor azt használva kezdeti értéként a metastabil likvidusz görbe szakasz is számolható. Az ún. nonvariáns pontok 0 K eltéréssel történő számítására az ESTPHAD módszer korábban nem volt alkalmas, ezért azok nagy pontosságú számítására új paramétereket vezettek be. Az ESTPHAD módszer hierarchikus felépítésének köszönhetően alkalmas többalkotós fázisdiagramok feldolgozására is. Négyalkotós oxid-rendszer ($MgO-Al_2O_3-CaO-SiO_2$) MgO-ban dús fázisának (periclase) likvidusz hőmérsékletét számították ki.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A Miskolci Egyetem, és így a kutatócsoport is rész vesz a „Kutatók éjszakája” rendezvény sorozaton, amely keretein belül az amorf fémek általános bemutatása mellett, az amorf anyagok készítését is kipróbálják az érdeklődők. A kutatócsoport tagjai folyamatosan találkoznak az egyetem nyílt napjának érdeklődőivel, ahol a kutatók éjszakájához hasonlóan bemutatják az amorf fémeket, valamint ellátogatnak középiskolákba az egyetem bemutatása céljából. A kutatócsoport részt vesz a középiskolásoknak rendezett tanulmányi versenyen, amelynek fő szervezője a Műszaki Anyagtudományi Kar, ahol a kutatócsoport székhelye is

megtalálható. A Kossuth rádió regionális adásában a kutatócsoport vezetője ismertette a csoport munkáját.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport tagjai részt vesznek a Miskolci Egyetem teljes körű tevékenységében, úgymint oktatás, beiskolázás, tudományos programok szervezése. Az itt működő doktori iskolával szorosan együttműködve meghirdették az amorf fémek tudományterületet, amelyre várják a fokozatot szerezni kívánó hallgatók jelentkezését. Egy fiatal kutatójuk 2010-ben PhD fokozatot szerzett. A kutatócsoport szerződésben áll a Schmelzmetall Hungária Kft-vel, amely keretén belül nemesíthető rézötvözetek tulajdonságainak vizsgálata és fejlesztése témában működnek együtt. A BAY-NANO kutatóintézzettel együttműködésben nagyfelbontású, átvilágításos elektronmikroszkóppal végeztek vizsgálatokat az amorfizált ötvözeteken.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Kutatási megbízás: Schmelzmetall Kft.: 9 MFt. A Nemesíthető rézötvözetek tulajdonságainak vizsgálata a hőkezelés függvényében

Pályázatok: Europea Space Agency: 240 000 EURO (80 000 EURO/év) Az olvadék áramlás hatása Al-Si(Cu,Mg) ötvözet mikroszerkezetére.

Magyar Űrkutatási Iroda (MŰI): 2 MFt. Az olvadék áramlás hatása az Al-Ni eutektikum mikroszerkezetére.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kovács J, Rónaföldi A, Roósz A: Effect of the high magnetic field (min. 30 mT) on the unidirectionally solidified structure of Al₇Si_{0.6}Mg alloy. Mater. Sci. Forum, 649: 263-268 (2010)
2. Budenkova O, Noeppl A, Kovács J, Rónaföldi A, Roósz A, Bianchi AM, Baltaretu MF, Medina Y, Fautrelle G: Comparison between simulation and experimental results of the effect of RMF on directional solidification of Al-7wt.%Si alloy. Mater. Sci. Forum, 649: 269-274 (2010)
3. Tomolya K, Janovszky D, Sveda M, Hegman N, Roosz A: Analysis of Cu-Zr-Al amorphisable alloys produced by centrifugal casting. Mat. Sci. Forum, 649: 93-99 (2010)
4. Janovszky D, Tomolya K, Sveda M, Solyom J, Roosz A: Analysis of Cu-Zr-Ag amorphisable alloys produced by centrifugal casting. Mat. Sci. Forum, 649: 75-80 (2010)
5. Svéda M, Janovszky D, Tomolya K, Solyom J, Buza G, Roósz A: Ni Content Surface Layer Produced by Laser Surface Treatment on Amorphizable Cu base Alloy. Mater. Sci. Forum, 649: 101-106 (2010)
6. Benke M, Mertinger V, Tranta F, Barkóczy P, Daróczy L: Supplement on Effects of heat-flux features on the differential scanning calorimetry curve of a thermoelastic martensitic transformation. Mater. Sci. Eng. A, 527(9): 2441-2443 (2010)
7. Rontó V, Nagy E, Svéda M, Tranta F, Hegman N: Investigation of the solidified structure of Cu-Hf-Ti alloys. Mater. Sci. Forum, 649: 81-86 (2010)
8. Nagy E, Rontó V, Solyom, Roósz A, Hegman N: Investigation of amorphous/ crystalline state in Cu-Hf-Al alloys. Mater. Sci. Forum, 649: 87-92 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: ME Anyagtudományi Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	10	Ebből kutató ² :	9
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			5
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			14
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			14
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	14
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	2
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	2,0	Összes független hivatkozás száma:	37
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	53		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			1
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	6
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	25,0	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	33,0 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:			0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:			0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			2
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	22,0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2,0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			9,0 MFt

ME MŰSZAKI FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

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 2010-ben

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. Módszertani 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:

- geotechnikai módszerek és integrált technológiák fejlesztése;
- konvencionális és nem konvencionális szénhidrogének hatékony kitermelését biztosító eljárások megalapozó kutatások;
- új inverziós geofizikai módszerek fejlesztése a földtani szerkezetek és természeti erőforrások kutatására.

A kutatás-fejlesztés súlypontját 2010-ben olyan új módszerek és technológiák megalapozása képezte, amelyek lehetővé teszik a hazai szénhidrogén vagyon kitermelési hatékonyságának növelését, az erőműi füstgázból történő CO₂ leválasztását, valamint újszerű geofizikai (inverziós) kiértékelő módszerek kifejlesztését.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az intenzív kőolajtermelés, illetve a megkutatott szénhidrogén vagyon kitermelési hatásfokának javítását célzó kutatások keretében olyan új, mikroemulziók besajtolására alapozott rétegserkentési eljárás kidolgozására került sor, amely alkalmas a földgáztárolókban és földalatti gáztárolókban üzemelő termelőkutakban a vízhányad csökkentésére, illetve a gáz/víz (GWR) arány javítására. A nemzetközi vonatkozásban is egyedülálló módszer jellemzője, hogy a víz tárolóbeli áramlásával szemben fellépő gáthatást a víz jelenléte fázis-inverzió keresztül generálja, miközben a nagy gáztelítettségű tárolóterekben a fluidumáramlás változatlan marad. A sikeres alap- és alkalmazott kutatásokra alapozott rétegkezelési technológia illesztése a MOL Nyrt. szakembereivel közösen kiválasztott két kútra (Pusztaszőlős, és Szeged/Szőreg telepeken) megtörtént, a művelet kivitelezése folyamatban van, és a kezelés várhatóan 2011. második felében végrehajtásra kerül. A MOL Nyrt. szakembereinek várakozása szerint a jelenleg kritikus víztermelés csökkentése lehetővé teszi a már lezárt kutak termelésbe állítását, a termelt rétegvíz környezetet károsító hatásának csökkentését és a termelési költségek mérséklését.

A mélységkoordináta-függő petrofizikai mennyiségek sorfejtéses inverziójára alapozva olyan új szelvényezési módszer kifejlesztésére került sor, amely startmodell-független, pontos és megbízható, emellett adekvát információt nyújt a réteghatárok helyzetéről, valamint egyéb

zóna-paramétereikről. A elsődleges mérési adatokra a szokványos pontonkénti inverzió csak korlátozottan, vagy egyáltalán nem alkalmas. Az új eljárás további előnye, hogy a gerjesztett polarizációs mérések időállandó (relaxációs) spektrumainak segítségével a közeg fémes, redox, diszperz agyagos, valamint az elektromosan vezető fluidumhoz kötött komponensei mind kvalitatív, mind kvantitatív jelleggel meghatározhatók. A kidolgozott 2D inverziós eljárás lehetővé tette a nehézségi erőter 3D potenciáljának előállítását is. Ezzel a módszerrel előállított potenciálfüggvény új irányokat nyit a közel száz évre visszatekintő, nagyszámú Eötvös-inga és gravitációs mérések, valamint a digitális terepadatok együttes inverziójára és újraértékelésére. Az így rekonstruált potenciál-függvényekből számos gyakorlati jelentőségű (földtani, bányászati, hidrológiai, stb.) új információ származtatható.

A szén és lignit alapú erőművek CO₂ kibocsátásának komplex műszaki elemzése bizonyította, hogy 80-90%-os emisszióscsökkentés érhető el, aminek következtében a 800-1000 g/kWh karbon kibocsátás 100-150 g/kWh értékre csökkenthető. A részletekbe menő költségelemzés azonban arra is rámutatott, hogy a beruházási többletköltség, valamint a CO₂ leválasztás, a legalább 50-60%-ra történő dúsítás, a szállítás, a geológiai formációba történő elhelyezés, a tárolók infrastruktúrájának kiépítése és az elhelyezést követő, több évtizedre kiterjedő monitorozás a villamos áramtermelés jelenlegi önköltségét 80-100%-kal növeli. A vizsgálatokból tehát az a stratégiai következtetés vonható le, hogy az erőművek CO₂ kibocsátásának csökkentése csak megosztott (állami és vállalati) finanszírozás mellett valósítható meg. A következmények társadalmi elfogadtathatóságának feltételei jelenleg sem Magyarországon, sem globálisan nem állnak fenn, ha a CO₂ megkötés/elhelyezés teljes költségének fedezésében sem állami támogatás, sem fogyasztói dotáció nem jelenik meg.

A külfejtési bányászati tevékenység során a vízkiemelési technológiák környezeti hatásvizsgálata a különböző minőségű vizek elhelyezésére likvidálására terjedt ki. A kutatásnak különös jelentőséget ad, hogy a Bükk hegység alján elhelyezkedő külfejtéseknél (Visonta, Bükkábrány) kiemelt víz mennyisége jelenleg 40-42 Mm³/év, ami várhatóan 10-20 éven keresztül nem csökken. Kimutatható, hogy a Tarna, Bükk-Borsodi Mezőség, valamint a Hevesi síkság alegységre számítható víztest 70-75%-os terhelése a külfejtésből kiemelt víztől származik. A vizsgálat központi kérdését a kiemelt víz ivóvízként, ásványvízként és öntöző vízként történő felhasználhatósága képezte.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai számos átfogó jellegű előadást tartottak, illetve összefoglaló anyagokat készítettek az ország energiastratégiájával foglalkozó szakmai és ismeretterjesztő fórumokon (MTA Energia Stratégiai Bizottság, Energia Klub, MOL Szabadegyetem, MTA-MAB rendezvények, stb.). Az előadások középpontjában az ország középtávú energiaellátásának általános kérdései, a várható energiamix előrejelzése és az általános társadalmi elvárások elemzése állt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Az Olajkémiai Kutatóintézettel, Orosz Tudományos Akadémia Szibériai Szekció, Tomszk, Oroszország „Intelligens kémiai rendszerekre alapozott kőolajtermelési módszerek alap és alkalmazott kutatása” című témában az MTA-RAS együttműködés keretében.

Oktatási és kutatási együttműködés a Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar tanszékeivel a földtudomány és a bányászati tudományok területén valamennyi kutatott témakörben.

Együttműködés a MOL Nyrt. Upstream divízióval a kizozatali hatásfok növelését célzó elárasztási és rétegkezelési technológiák kidolgozása, és a hazai szénerőművek hatékony üzemeltetésével és környezetvédelmi kérdéseivel kapcsolatos témakörben.

Universita degli Studi „La sapienza” Roma, Olaszország és Aalto University Helsinki, Finnország, felsőoktatási intézményekkel a korszerű inverziós geofizikai módszerek fejlesztése a nagy- és sekély mélységű geológiai szerkezetek feltárása céljából.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok

A kutatócsoport 2010-ben nem nyert el új pályázatot.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Gyulai Á, Ormos T, Dobróka M: A Quick 2-D Geoelectric Inversion Method Using Series Expansion. Journal of Applied Geophysics, 72: 232-241 (2010), ISSN: 0926-9851
2. Tóth J, Bódi T, Szűcs P, Civan F: Determining Effective Fluid Saturation, Relative Permeability, Heterogeneity and Displacement Efficiency in Drainage Zones of Oil Well Producing Under Waterdrive. Journal of Canadian Petroleum Technology, 49(11): 69-80 (2010), ISSN: 0021-9487
3. Lakatos I, Bódi T, Lakatos-Szabó J, Szentes G: Mitigation of Formation Damage Caused by Water-Based Drilling Fluids in Unconventional Gas Reservoirs. Soc. Pet. Eng. (USA) Paper 127999 (2010), Proceedings of SPE International Symposium and Exhibition on Formation Damage Control, Lafayette, LA, USA
4. Lakatos I: The 21st Century: Age of Chemistry in Production of Conventional and Unconventional Hydrocarbons. Keynote Paper, BITs 1st Annual World Congress of Well Stimulation and EOR (WSOR-2010), Economic Challenges, Innovation and Sustainability, 12-14 April 2010, Chengdu, China
5. Vass P, Dobróka M: Sorfejtéses inverzió: Fourier-transzformáció, mint inverz feladat. Magyar Geofizika, 50: 141-152 (2010), ISSN: 0025-0120
6. Dobróka M, Völgyesi L: Sorfejtéses inverzió IV.: A nehézségi erőtér potenciálfüggésének inverziós előállítás. Magyar Geofizika, 51: 143-149 (2010), ISSN: 0025-0120

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	3	Ebből kutató ² :	2
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			14
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			14
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 6	idegen nyelven:	0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	2
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	1,0	Összes független hivatkozás száma:	25
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	25		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			6
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	8
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		12,0	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

MTM PALEONTOLOGIAI KUTATÓCSOPORT

Vörös Attila, az MTA rendes tagja
Budapest VIII., Ludovika tér 2., 1431 Budapest, Pf. 137;
telefon: 1-210 1075, 1-338 3905; fax: 1-338 2728
e-mail: voros@nhmus.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatócsoport hosszú távú feladata alap kutatások végzése a bioszféra nagy változásainak elemzése céljából. A beszámolási év fő feladatai voltak:

- Mezozoós kihalási események szinoptikus őslénytani és stabil izotópos vizsgálata.
- Középső-triász Ammonoidea és Ostracoda faunák taxonómiai feldolgozása.
- A mezozoós Radiolaria evolúció a paleoceanográfiai változások tükrében.
- Az iharkúti késő-kréta fauna összehasonlítása más, európai kréta kontinentális faunákkal.
- A Kárpát-medence kvarter emlősfauna közösségeinek paleoökológiai vizsgálata.
- Magashegységi tavak késő-negyedidőszaki üledékszelvényeinek komplex paleoökológiai feldolgozása; paleogenetikai vizsgálatok.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Kimutatták, hogy a perm-végi bioszféra katasztrófát túlélő négy brachiopoda rend közül kettő (Athyridida, Spiriferinida) a kora-jurában halt ki. Ezt megelőzően, a triász végi csaknem teljes kihalást a jura elején felvirágzás követte. A két fázisban végbement kihalás legvalószínűbb oka a fenti rendekre jellemző, spirális kartámasztó vázhoz rögzült lophophora volt.

Kimutatták, hogy a Balaton-felvidéki triász faunák (ammonoidea, bivalvia, brachiopoda) diverzitásának időbeli változásai jelentősen eltérnek az illető ősmaradványcsoportok globális diverzitásának változásaitól. Az ammonoideák esetében ezt az óceánokkal fennálló kapcsolat változása, a másik két csoportnál a helyi tengereljárás és tápanyagellátás viszonya idézte elő.

A Balaton-felvidéki középső-triász Ostracoda anyagból 41 fajt mutattak ki. A paleozoos gyökerekre visszavezethető fauna összetétele arra utal, hogy stabil, több száz méteres vízmélységgel jellemezhető tengeri környezet uralkodhatott az anisusi és ladini folyamán.

A Kelet-törökországból gyűjtött, 160 példányból és 13 fajból álló pliensbachi brachiopoda fauna az ÉNy-európai faunaprovincia jellegeit tükrözi és a Kelet-balkáni és a Krim-félszigeti faunákkal mutatja a legnagyobb hasonlóságot.

A Hárskút melletti alsó kréta szelvényből integrált rétegtani feldolgozással kimutatott pozitív szénizotóp-anomáliát a Weissert-esemény jeleként értelmezték.

Elvégezték a kelet-ausztriai pteroszaurusz leletek revízióját. A részletes összehasonlító vizsgálat igazolta, hogy a korábban ornithocheirida pteroszaurusz maradványoknak tartott leletek az azhdarchida csoportba tartoznak és ezzel az ornithocheirida pteroszauruszok időbeli elterjedésének felső határa a campani helyett csak a cenománig terjed.

Vizsgálataik eredményeképpen kiderült, hogy bár néhány pteroszaurusz faj esetében számos olyan kapcsolódási pont található, ahol az egyes csontok el tudtak volna mozdulni egymás mellett, összeségében a koponyán belül nem volt számottevő koponyacsontok közti mozgás, így pl. streptostylia sem, tehát a pteroszauruszoknál nem volt kraniális kinezis.

Az iharkúti dinoszaurusz ásatások eddigi legjelentősebb eredményeképpen 2010 nyarán előkerültek az első biztos európai Ceratopsia dinoszaurusz maradványok, ami azt bizonyítja,

hogy nem csak endemikus és gondwanai eredetű dinoszauruszok éltek Európában a kréta időszakban, hanem ázsiai eredetű bevándorló csoportok is megjelentek a területen.

Kimutatták, hogy az *Iharkutosuchus makadii* Ősi, Clark & Weishampel 2007 egy heterodont fogazatú, specializált táplálkozási stratégiával bíró primitív Eusuchia krokodil, mely a Gavialoidea, a Crocodyloidea és az Alligatorioidea formáknál filogenetikailag ősbibb csoportot képvisel.

Oxigén izotópos vizsgálatokkal igazolták, hogy az eocén/oligocén határ közelében a magyarországi Paleogén Medence még kapcsolatban állt a világóceánnal, és hogy itt is kimutatható az az Északi-féltekén jelentkező markáns klímaváltozás (lehülés).

Új süttői lelőhelyek emlősfaunájának feldolgozásával az eddig ismert alsó- és felső-pleisztocén emlősfaunák mellett, a középső-pleisztocén korú fauna meglétét is igazolták.

Paleogenetikai vizsgálatokkal kimutatták, hogy a DK-i Kárpátok az utolsó eljegesedés során diverz génállományú lucfenyő populációnak adott otthont, majd a holocén felmelegedés, a várttal ellentétben, a genetikai diverzitás csökkenéséhez vezetett. Mivel a lucfenyő retyezáti populációi a csökkenő diverzitás mellett számos área-specifikus allélt hordoznak, összeszűkülőben lévő populációjuk védelme kiemelten indokolt.

Felismerték, hogy az elmúlt 12000 évben a Nagyalföldön uralkodó növénytakaró mindvégig mérsékeltövi lombhullató erdőssztyep volt. Az erdőssztyep táj kultúrsztyepként antropogén erdőirtások révén alakult át, mintegy 3500 - 3000 évvel ezelőtt.

Az említett iharkúti dinoszaurusz kutatások eredményei pótolhatatlan értékekkel gazdagítják a *nemzeti kulturális örökséget*, a negyedidőszaki paleogenetikai eredményeknek pedig a *természetvédelmi* döntéshozók számára lehet nagy jelentősége.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai több nyilvános eseményen és 15 ismeretterjesztő előadáson számoltak be kutatásaikról. Átütő sikert hozott, és kiemelkedő mértékben erősítette a paleontológia társadalom iránti nyitottságát az, hogy az *Ajkaceratops* nevű új iharkúti dinoszaurusz leírása a *Nature*-ban jelent meg, melyet nagy sajtóvisszhang követett (egy sajtótájékoztató, és több mint 70 hazai és külföldi médiamegjelenés).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet játszanak a hazai őslénytani tudományos közéletben, mint a Magyarhoni Földtani Társulat Őslénytani-Rétegtani Szakosztályának vezetőségi tagjai. A kutatócsoport vezetője az MTA Földtudományok Osztálya elnökhelyettese, a Magyarhoni Földtani Társulat társelnöke, hazai szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja, valamint a Nemzetközi Triász Rétegtani Albizottság szavazati jogú tagja. A kutatócsoport egy tagja az OTKA Földtudomány I. Zsűri elnöke, hazai és nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja, valamint a Nemzetközi Jura Rétegtani Albizottság elnöke.

A kutatócsoport tagjai speciális kollégium és doktori kurzus tartásával vállalnak részt az ELTE TTK, valamint a kolozsvári Babes-Bolyai Egyetem geológus képzésében.

A kutatómunka során aktív nemzetközi együttműködés folyik amerikai, angol, francia, svájci, német, romániai, és norvég kutatókkal.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA K81298: „A mezozoós tengeri forradalom kezdeti szakasza és a középső triász radiatív evolúció összefüggéseinek vizsgálata”

OTKA K72633: „A mezozoós geológiai időskála egyes részeinek pontosabb kalibrálása és alkalmazása bioszféra-történeti kutatásokban”

OTKA PD73021: „A magyarországi késő-kréta Archosauria fauna vizsgálata”

OTKA PD73234: „A holocén klíma- és környezet nagyfelbontású, multi-proxi rekonstrukciója a Kárpáti-régióban: a vegetáció válaszreakciója a koraholocén felmelegedési hullámokra magashegységi és alföldi környezetben”

NKTH Tét (2009-2010): „A magyarországi és dél-franciaországi késő-kréta kontinentális gerinces lelőhelyek összehasonlítása: következtetések a késő-kréta Mediterráneum szárazföldi paleobiogeográfiai helyzetét illetően”

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Buczkó K, Ognjanova-Rumenova N & Magyari E: Taxonomy, morphology and distribution of some Aulacoseira taxa in glacial lakes in the South Carpathian Region. Polish Botanical Journal, 55:(1) 149-163 (2010)
2. Magyari E K, Chapman J C, Passmore D G, Allen J R M, Huntley J P & Huntley B: Holocene persistence of wooded steppe in the Great Hungarian Plain. Journal of Biogeography, 37:(5) 915-935 (2010)
3. Haas J, Pelikán P, Görög Á, Ozsvárt P, Józsa S & Kövér S: Subduction related jurassic gravity deposits in Bükk-Darnó Area, Northeast Hungary. Scientific Annals of the School of Geology, Aristotale University of Thessaloniki, Faculty of Sciences 99: 149-156. (2010)
4. Ősi A, Butler J R & Weishampel D B: Late Cretaceous ceratopsian dinosaur from Europe with Asian affinities. Nature, 465: 466-468 (2010)
5. Ősi A, Apesteguía S. & Kowalewski M: Non-avian theropod dinosaurs from the early Late Cretaceous of Central Europe. Cretaceous Research, 31:(3) 304-320. doi: 10.1016/j.cretres.2010.01.001 (2010)
6. Haas J, Götz A & Pálffy J: Late Triassic to Early Jurassic paleogeography and eustatic history in the NW Tethyan realm: New insights from sedimentary and organic facies of the Csővár Basin (Hungary). Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology, 291:(3-4) 456-468 (2010)
7. Mundil R, Pálffy J, Renne P R & Brack P: The Triassic time scale: new constraints and a review of geochronological data. In Lucas, S.G. (ed.): The Triassic Timescale. Geological Society, London, Special Publications, 334: 41-60 (2010)
8. Tóth E, Görög Á, Lécuyer C, Moissette P, Balter V, Monostori M: Palaeoenvironmental reconstruction of the Sarmatian (Middle Miocene) Central Paratethys based on palaeontological and geochemical analyses of foraminifera, ostracods, gastropods and rodents. Geological Magazine, 147: (2) 299-314 (2010)
9. Vörös A: Escalation reflected in ornamentation and diversity history of brachiopod clades during the Mesozoic marine revolution. Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology, 291: (3-4) 474-480 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: MTM Paleontológiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	5	Ebből kutató ² :	5
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			32
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			28
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban magyarul:	1	idegen nyelven:	5
<i>külföldi</i> folyóiratban magyarul:	0	idegen nyelven:	13
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	10
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	4
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	52,94	Összes független hivatkozás száma:	245
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	277		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			10
		poszterek száma:	5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSOÓKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	1

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		20,2	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	6,8 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	6,0	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0,8 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

PE LEVEGŐKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

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 2010-ben

A légköri szerves aeroszol képződésének, összetételének és átalakulásának vizsgálata, különös tekintettel a másodlagos aeroszolképződésre; a légköri aeroszol forrásainak azonosítására alkalmas szerves vegyületek vizsgálata; adatszolgáltatás nemzetközi adatbázisba a légköri aeroszol fizikai tulajdonságairól; a finom légköri aeroszolban a vízben oldódó szénhidrátok előfordulásának vizsgálata; nemzetközi együttműködésben nagyfelbontású tömegspektrométerrel és többdimenziós mágneses magrezonancia mérésekkel a szulfát-észter képződés mechanizmusának tisztázása; az aeroszolrészecskék optikai tulajdonságainak és a részecskék kémiai összetételének kapcsolatának tanulmányozása; hazai együttműködésben a budapesti PM10 aeroszol a téli magas légszennyezettségi állapotok kialakulásáért felelős aeroszolforrásainak meghatározása.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A beszámolási időszakban Budapesten az Országos Meteorológiai Szolgálat Gilice téri Marczell György Főobszervatóriumának (MGYFO) területén aeroszolmintákat gyűjtöttek 2009. december 8. és 2010. március 18. között. A PM10 koncentráció meghatározásához szabványos béta-sugárzás mérőt, nyomjelző vegyületek azonosításához PM10 személyi mintavevőt, az elemi összetétel meghatározásához pedig a részecske indukált röntgen-emisszió (PIXE) módszerét alkalmazták párhuzamosan 24 órás mintavételek során. A fő alkotók és az egyes forrástípusokra jellemző nyomjelző vegyületek koncentrációjának meghatározását követően az aeroszol tömegmérlegének felállításán keresztül becsültük a főbb forrástípusok relatív hozzájárulását. A vizsgált időszakban a háztartási fatüzelés becsült tömegjáruléka 14 és 39 % között változott, a napi átlaghőmérséklettől és a hét napjaitól erősen függő módon. Az egészségügyi határérték túllépésével járó szmoghelyzetekben a jellemzően alacsony átlaghőmérséklet a HYSPLIT modell által számolt keveredési réteg magasság ugyancsak alacsony értékével párosul, és ez a források intenzitásának (elsősorban a háztartási tüzelés mértékének) növekedésével együtt jelentősen megnöveli a PM10 tömegkoncentrációjának értékét. Az alacsonyabb léghőmérséklettel együtt járó magasabb relatív páratartalom tovább csökkenti a nappali besugárzás mértékét, és jellemzően rontja a hőérzetet is, ezzel tovább erősíti a kedvezőtlen folyamatokat. A PM10 tömegkoncentrációjának közel 50 %-át kitevő széntartalmú részecskék forrásai az eredmények alapján 2/3 részben a fatüzeléshez, és csak 1/3 részben a közlekedési emisszióhoz köthetők. A tömegkoncentráció és a vízfelvétel jelentős részéért felelős szulfát- és nitrát alkotók másodlagos eredetűek, az elvégzett trajektóriaszámítások alapján elővegyületeik forrásai nagyobb régiókból származnak, így koncentrációjuk csökkentésére helyi intézkedésekkel kevés esély kínálkozik. A vizsgálatok hozzájárulnak a határérték-túllépés szempontjából a legkritikusabb levegőszennyező, a PM10 koncentrációjának csökkentésére irányuló hatékony intézkedések kidolgozásához.

Speciális mintavevő berendezést fejlesztettek ki és építettek városi reszuszpendálható por belélegezhető frakciójának (PM10) szelektív mintavételezésre. A hordozható generátorról táplált mobil mintavevő berendezés a szél és a járművek mozgásának hatását szimulálja, a felvert port előleválasztást követően kétfokozatú PARTISOL-FRM MODEL 2000

mintavevővel gyűjti. A mintavevő tesztelését megkezdték, majd 2010. októberében a kolontári vörösiszap katasztrófa következményeinek vizsgálatánál is alkalmazták.

A kutatócsoport tagjai mintaelőkészítési módszert dolgoztak ki a szűrőre gyűjtött aeroszolrészecskék biológiailag releváns kontakt ökotoxicitásának Aboatox Flash rendszerrel történő meghatározására, elvégezték a szabványos ToxAlert rendszerrel való összehasonlító vizsgálatokat. A PM10 szűrőminták kontakt ökotoxikológiai vizsgálatára kidolgozott mintaelőkészítési módszer nemzetközileg módszertani újdonság, a vizsgált rendszerben kiválóan alkalmazhatónak bizonyult. A PM10 aeroszol ökotoxikológiai hatása évszaktól és környezeti tényezőktől jelentős mértékben függő változékonyságot mutat. A városi aeroszol ökotoxicitásáért nemcsak a közvetlen gépjármű motoremiszió, hanem ún. diffúz emisszió (fékbetétek, gumiabroncsok kopása, felvert por, stb.) és más források is felelősek.

Szennyező forrásoktól távoli, ún. háttérlevegőben vizsgálták a légköri aeroszol részecskék optikai tulajdonságait a tömegkoncentráció (PM10) függvényében. A többéves eredmények azt mutatják, hogy mind az elnyelési, mind a szórási együtthatók közel lineárisan nőnek a tömegkoncentráció növekedésével ($PM_{10} < 85 \mu g m^{-3}$). A mérések szerint a visszaszórás részaránya a tömegkoncentráció növekedésével csökken, s a hullámhossz növekedésével egyre jelentősebb ez a csökkenés, vagyis a légköri modellekben alkalmazott visszaszórási hányad nem tekinthető állandónak. Az eredmények szerint a PM10 növekedésével nő az egyszeres szórási albedó átlagos értéke, ami a szórási együttható nagyobb, az elnyelési együttható kisebb mértékű növekedésének következménye. A szórási együttható hullámhossz-függését az Angström-kitevő (α) meghatározásával vizsgálva megállapították, hogy a PM10 növekedésével a vizsgált teljes hullámhossztartományban csökken α értéke. Ez a csökkenés azt jelzi, hogy a tömegkoncentráció növekedése egyben az átlagos részecskeméret növekedésével is együtt jár. A kutatási eredmények hozzájárulnak a légköri aeroszol részecskék közvetlen éghajlati hatásának meghatározásához, pontosítják a modellszámítások eredményeit.

Európai uniós kutatási projektben vállalt kötelezettségüknek megfelelően a K-pusztán kialakított monitoring rendszerrel folyamatos adatszolgáltatást végeztek a légköri aeroszol fizikai jellemzőiről (méreteloszlás), optikai tulajdonságairól (fényszórás, fényelnyelés) és széntartalmáról. Az EUSAAR (Super-sites for Atmospheric Aerosol Research) projekt keretében részt vettek a mintavételi műtermékek mennyiségi jellemzése érdekében szervezett nemzetközi mintavételi kampányban és az ahhoz kapcsolódó elemzésekben. Megállapították, hogy kvarcszűrőre történő 24 órás mintavétel során az aeroszolt alkotó közepesen illékony szerves vegyületek eltávozása akár több mint 15%-os hibát is okozhat a széntartalom meghatározásában.

Vizsgálatokat végeztek a finom légköri aeroszol eddig azonosítatlan vízoldható szerves hányadának azonosítása érdekében. Korábbi szakirodalmi adatok és saját tapasztalatok arra utaltak, hogy a vízoldható szerves vegyületek jelentős hányadát szénhidrátok képezhetik, ezért ezt a vegyületcsoportot tanulmányozták részletesen. A K-pusztán gyűjtött aeroszol mintákon különböző analitikai technikákkal végzett vizsgálatok alapján arra a következtetésre jutottak, hogy nem valószínű oligoszacharidok előfordulása jelentős mennyiségben a vízoldható frakcióban.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai aktív szerepet vállaltak a kolontári vörösiszap katasztrófa lehetséges következményeinek felmérésében, a vörösiszap szálló pora kiporzásának vizsgálatával. A katasztrófát követően azonnal laboratóriumi vizsgálatokkal határozták meg a kiszáritott vörösiszap üledék kiporzásának mértékét, a szálló por méreteloszlását és kémiai összetételét,

beleértve az egészségre potenciális veszélyt jelentő nehézfémek és ásványos fázisok koncentrációját, illetve a lúgosság értékét. Ezt követően az általuk a felporzás mérésére kifejlesztett speciális mintavevővel terepi mintavételezést is végeztek, és a vizsgálatokat az így gyűjtött mintákon is elvégezték. Megállapították, hogy a vörösiszap üledék extrém mértékű kiporzásra hajlamos, de méreteloszlása valamint kémiai összetétele okán a vörösiszap szálló porának fajlagos veszélyessége valószínűleg alatta marad a nagyvárosi szálló porénak. Eredményeiket folyamatosan öt kutatási részjelentésben megküldték az MTA főtitkárnak, amelyben ajánlásokat fogalmaztak meg a szükséges védekezés módját illetően is.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Kétoldalú kormányközi kutatási szerződés keretében közös kutatást indítottak a zágrábi Ruder Boskovic Intézettel. A 2010-es évben 3 horvát kutató Magyarországon, illetve a kutatócsoport két tagja Horvátországban vett részt mintavételi kampányban. A kutatócsoport tagjai részt vettek a Pannon Egyetemen a Légekörtan, Levegőkémia, Környezeti megfigyelési rendszerek, Környezeti analitika c. tárgyak oktatása és a „Kémiai és Környezettudományok Doktori Iskola” munkájában.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport egy európai konzorcium tagjaként sikeresen pályázott egy 4 éves futamidejű FP7-es projekt támogatására (Aerosols, Clouds, and Trace gases Research Infrastructure Network, ACTRIS). A kutatócsoport által elnyert EU támogatás mértéke a projektben 52 ezer€.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Schmitt-Kopplin P, Gelencsér A, Dabek-Zlotorzynska E, Kiss G, Hertkorn N, Harir M et al. (8): Analysis of the Unresolved Organic Fraction in Atmospheric Aerosols with Ultrahigh-Resolution Mass Spectrometry and Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: Organosulfates As Photochemical Smog Constituents. *Anal. Chem.*, 82: 8017–8026 (2010)
2. Frosch M, Prisle NL, Bilde M, Varga Z, Kiss G: Joint effect of organic acids and inorganic salts on cloud droplet activation. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 10: 17981–18023 (2010) doi:10.5194/acpd-10-17981-2010
3. Engling G, Gelencsér A: Atmospheric Brown Clouds: From local air pollution to climate change. *Elements*, 6: 223–228 (2010).
4. Kundu S, Kawamura K, Andreae TW, Hoffer A, Andreae MO: Molecular distributions of dicarboxylic acids, ketocarboxylic acids and alpha-dicarbonyls in biomass burning aerosols: implications for photochemical production and degradation in smoke layers. *Atmos. Chem. Phys.*, 10(5): 2209-2225 DOI (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: PE Levegőkémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	4	Ebből kutató ² :	3
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			8
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
			8
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:
			8
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven:
			0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	30,93	Összes független hivatkozás száma:	511
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	420		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			1
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	21,6	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:
		34,0
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0
		MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:		1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		7,3
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0
ÚMFT témák száma:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		19,9
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0
		MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:		2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		6,8
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:
		0
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		0
		MFt

PPKE-SE NEUROBIOLÓGIAI ÉS INFOBIONIKAI PLASZTICITÁS KUTATÓCSOPORT

Roska Tamás, az MTA rendes tagja
1083 Budapest, Práter u. 50/a.
telefon: 1-886 4703; fax: 1-886 4724
e-mail: roska@sztaki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Mozgásmintázatok dinamikus modellezése és implementációja robotokon: a Biomechatronikus robotkéz. Célunk egy olyan biomechatronikus robotkéz kifejlesztése volt, mely az emberi anatómia megoldásait követi, megőrzi az arányokat és a szabadságfokokat. Fontos szempont, hogy a tervezett robotkéz a magasabb szintű vezérlés mellett rendelkezzen olyan alacsony szintű szabályzással, mely hasonló az emberi reflexekhez.

A hippocampusz funkcionális modellje. A kutatás célja a különböző érzékelő modalitásokból érkező információ integrációjában, a hosszútávú memóriában és a térbeli navigációban alapvető szerepet játszó agykérgi terület, a hippocampusz (ezen belül elsőként a CA1 régió) legfontosabb idegsejt-típusainak részletes biofizikai modellezése, valamint a hippocampális hálózati dinamika modellezése.

Szenzoros kérgi funkciók szerveződése. A kutatás célja az érzékelés alapjául szolgáló strukturális jellegzetességek vizsgálata főemlősök agykérgében. Továbbá cél a nagyskálájú kérgi hálózatok működésének megértése. Hálózatelemző módszerekkel történik a vizsgálata 1, az egyes kapcsolatokon és 2, az egyes áréakban lejátszódó lehetséges direkt és indirekt kölcsönhatásokat az áréak között az ismert kérgi hálózatokban.

A 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. A kutatások kiterjednek a fiatal felnőtt amblyopok és diszlexiások figyelem funkcióinak vizsgálatára.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Mozgásmintázatok dinamikus modellezése és implementációja robotokon: a Biomechatronikus robotkéz. *Kinematikai váz:* a robotkéz vázát 3D tervezőprogrammal és speciális 32 µm vastag rétegű nyomtatási technológiával készítették el. Az „inakknak” elvezető csatornákat tudtak kialakítani és az ujjbegyek rugalmasságát tetszés szerint tervezhették meg. A kinematikai váz követi az emberi kéz arányait és szabadságfokait.

Vezérlés: Nem csak szerkezeti megjelenésében, hanem a vezérlésben is követjük az embernél megtalálható megoldások elveit: az erő kifejtés különálló egységként játszik szerepet és a kapcsolatot mesterséges inak valósítják meg. A vezérlés az embernél megtalálható flexor-extenzor elvet követi. Minden egyes szabadságfok rendelkezik egy meghajtó „flexor-extenzor” motorpárral, mely az egyes szabadságfokok pontosabb szabályozását teszi lehetővé.

Szenzorok: Alapvetően kétféle szenzorral rendelkezik az általunk tervezett robotkéz. A tenyéren és az ujjbegyekben elhelyezett 3D tapintószenzorokkal melyekkel az egyes megfogások mozdulatainak vezérlését segítik, valamint érzékelik a tárgyak rugalmasságát is. A motorok tengelyeinek helyzetét és ezáltal az ujjak kinematikai helyzetét mágneses enkóderekkel határozzák meg.

A hippocampusz funkcionális modellje. Sikerült létrehozni egy olyan hippocampális szeletpreparátumot, melyben kontroll körülmények között spontán ismétlődő éles hullám-aktivitás figyelhető meg, kolinerg drogok hatására viszont ritmikus gamma aktivitás alakul ki. Ezzel párhuzamosan sikerült kifejleszteni a CA3 régió nagy skálájú, piramis sejtet és interneuronokat tartalmazó hálózati modelljét, melyben a kísérletileg meghatározott

paraméterek mellett a megfigyelthez nagyon hasonló (repetitív, és magas frekvenciás „ripple” komponens is tartalmazó) éles hullámok alakultak ki. A modell sejt- és hálózati paramétereit a kísérletileg meghatározott kolinerg hatásnak megfelelően áthangolva gamma frekvenciás oszcilláció jött létre, ezzel igazolva azt, hogy a kolinerg bemenet ismert sejt- és szinapsziszintű hatásai elégségesek a megfigyelt hálózati állapotátmenetek magyarázatára.

Szenzoros kérgi funkciók szerveződése. A kérgi hálózat topológiájával kapcsolatos eredményeik: Továbbfejlesztettek és kiterjesztettek az általuk bevezetett és az agykérgi hálózatra alkalmazott konvergencia mérték, CD alkalmazását más hálózattípusokra. Továbbá, befejezték a kérgi hálózat robusztusságának és plaszticitásának vizsgálatát a CD érték alapján megkülönböztetett „forward” és „backward” kérgi összeköttetések szelektív kiütése során.

Elemi tapintási funkciójú kérgi modulok összeköttetései a szomatoszenzoros kéregben: Bidirekcionális pályajelöléssel főemlősökben feltérképezték a primer szomatoszenzoros kérgi área 3b d2 -es ujjbegy reprezentációjának intrinsic , és szomszédos szomatoszenzoros kérgi áréakkal (3a, 1 és 2) létesített neuronális összeköttetéseit. Funkcionális kérgi térképek segítségével meghatározták a be- és kimenetek specificitását.

A szöveti nem-specifikus alkalikus foszfatáz (TNAP) idegrendszeri szerepe: Befejezték a TNAP-KO génkiütött egerek kvantitatív elektronmikroszkópos adatainak feldolgozását. A TNAP enzimhisztokémiai lokalizációjával kapcsolatos humán agykérgi vizsgálatokat befejezték az eredményeket leközltek.

A látás és vizuális figyelem idegrendszeri folyamatai és plaszticitása:

A figyelmi szelekció plaszticitásának dinamikája: Pszichofizikai és EKP módszerekkel sikerült jellemezni a figyelmi szelekció tanulás által történő modulációjának dinamikáját. A tanulási hatás két eltérő komponensét sikerült azonosítani: 1. egy korai komponens, mely a tanulás alatt jelenlévő vizuális ingerek látókérgi feldolgozását befolyásolja; 2. egy későbbi komponens, mely a parietális kérgi perceptuális döntési folyamatokat modulálja.

Az adaptív emberi hangfeldolgozás agykérgi szintjei: fMRI segítségével sikerült azonosítani és jellemezni az emberi hangfeldolgozás agykérgi szintjeit. Kimutatták, hogy a hangok korai feldolgozása a hallókéregben valamint azok kategória-specifikus kódolása az anterior temporális kéregben felnőtt korban is megőrzi plaszticitását.

Felnőttkori számítógépes diszlexia teszt: Kidolgozták egy magyar nyelvű számítógépes tesztrendszert a diszlexia felnőttkori szűrésére. A tesztrendszer viládálása és a standard adatok gyűjtése folyamatban van.

Az eredmények lehetséges klinikai és mérnöki alkalmazási területei:

- Alapját képezhetik új, a specifikus figyelmi funkciók zavarainak korai és megbízható detektálására valamint azok kezelésére alkalmas terápiás eljárások kidolgozásának;
- Algoritmikus implementációjuk hozzájárulhat zajos környezetben is hatékony, ingerkörnyezetekhez adaptálódni képes mesterséges látórendszerek tervezéséhez.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai számos tudománynpszerűsítő előadást tartottak és rádió- valamint tévéinterjút adtak. A Pázmány Péter Katolikus Egyetem Információs Technológiai Karán tartott nyílt napokon a csoport tagjai gimnazistáknak tartottak számos sikeres ismetető előadást és gyakorlati bemutatót a robotikai és funkcionális MRI kutatásaikról. A PPKE Kutatók Éjszakája 2010 rendezvény központi eseményét is a kutatócsoport bemutatói képezték.

A tanulási nehézségek a legutóbbi felmérések szerint a populáció akár 10-12 %-át is érinthetik, melyek közül a leggyakoribb az olvasási nehézség, a diszlexia. Ebből adódóan, a diszlexia kutatása nem csak az érintettek, hanem az egész társadalom szempontjából kiemelt jelentőséggel bír. Diszlexiával kapcsolatos kutatásaikat szoros együttműködésben végzik tanulási nehézségekkel küzdő fiatalok képzésében résztvevő pedagógusokkal és gyógypedagógusokkal (többek között az Öveges József Szakképző Iskola tanáraival). A BME

Kognitív Központjával közösen kifejlesztett felnőtt számítógépes tesztprogramuknak különösen nagy jelentőségét az adja, hogy ez az első felnőtt diszlexia szűrésére alkalmas magyar nyelvű tesztrendszer.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Hazai kapcsolatok: PPKE Információs Technológiai Karán, a Semmelweis Egyetemnek és az MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézetének több csoportjával is együttműködik.
Vállalati kapcsolatok: Richter Gedeon Zrt., Tateyama és NVIDIA; Varinex Kft.

Nemzetközi kapcsolatok: 1. Téma: European Research Network for Investigating Human Sensorimotor Function in Health and Disease (ERNI-HSF). 2007-11; Steering Committee Member: Vidnyánszky Zoltán; 2. Téma: A szomatoszenzoros kérgi funkciók szerveződése, Roe A.W. Vanderbilt Univ, USA

A csoport tagjai aktívan részt vesznek a PPKE Információs Technológiai Karán folytatott alap és doktori képzésben. A csoport munkájához 11 PhD hallgató és 13 egyetemi hallgató kapcsolódik.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA NN79366 (2010-2013) Funkcionális taktilis kérgi reprezentációk huzalozása: kombinált „optical imaging” valamint fény- és elektronmikroszkópos pályajelöléses vizsgálatok a főemlősök szomatoszenzoros kérgében.

OTKA-NKTH CNK (2010-2012) Koherens tulajdonságrendszerek a mesterséges és az emberi látásban.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Rák Á, Cserey Gy: Macromodeling of the memristor in spice. IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits And Systems, 29(4): 632-636 (2010)
2. Rák A, Gandhi G, Cserey Gy: Chua's circuit topology evolution using genetic algorithm. International Journal of Bifurcation and Chaos, 20(3): 687-696 (2010)
3. Négyessy L, Xiao J, Kántor O, Kovács GG, Palkovits M, Dóczi TP, Renaud L, Baksa G, Glasz T, Ashaber M, Barone P, Fonta C: Layer-specific activity of tissue non-specific alkaline phosphatase in the human neocortex. Neuroscience, 13(172): 406-418 (2010)
4. Zemankovics R, Káli S, Paulsen O, Freund TF, Hájos N: Differences in subthreshold resonance of hippocampal pyramidal cells and interneurons: the role of h-current and passive membrane characteristics. Journal of Physiology (London), 588(12): 2109-2132 (2010)
5. Gál V, Kóbor I, Bankó EM, Kozák LR, Serences JT, Vidnyánszky Z: Electrophysiological correlates of learning-induced modulation of visual motion processing in humans. Frontiers in Human Neuroscience, 3(69): 1-11 (2010)
6. Bankó EM, Vidnyánszky Z: Retention interval affects visual short-term memory encoding. Journal of Neurophysiology 103: 1425-1430 (2010)
7. Andics A, McQueen JM, Petersson KM, Gál V, Rudas G, Vidnyánszky Z: Neural mechanisms for voice recognition. Neuroimage, 52(4): 1528-1540 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: PPKE Infobionikai és Neurobiológiai Plaszticitás Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	7	Ebből kutató ² :	5
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			35
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			35
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 12
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 12
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 2
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	34,13	Összes független hivatkozás száma:	235
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	235		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora: 0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			2
	posztterek száma:		13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	3		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	6	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	11	PhD:	11
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		34,6	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	24,0 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	19,0	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			0
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		5,0	MFt

SZTE ANALÍZIS ÉS SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

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 2010-ben

Kutatások végzése és az elért eredmények közzététele a következő területeken:

Harmonikus és Fourier-analízis, potenciálmélet. Ortogonális polinomok zérushely-eloszlásának vizsgálata ún. duplázó súlyok esetén. Ezek tűnnek a legáltalánosabb súlyfüggvényeknek, amelyekre még igaz a klasszikus ortogonális polinomok sok tulajdonsága, pl. a gyökök egyenletes eloszlása. Az ortogonális polinomok elméletében alapvető szerepet játszó Christoffel függvények tulajdonságai fontos szerepet játszanak a spektrálméletben. A Christoffel függvények lokális viselkedéséről semmi nem ismert, ha nincs globális feltétel.

Funkcionál-differenciálegyenletek kvalitatív vizsgálata, lokális és globális dinamika, globális attraktorok, dichotómia eredmények negatív Schwarz-derivált esetén. Influenza-pandémia modellje, intervenciós stratégiák kidolgozása és értékelése, korstrukturált modellek. Eltűnő immunitás hatása a járványok dinamikájában, fertőzések perzisztenciája. Másodrendű differenciálegyenletek viselkedése.

Speciális populációméret változásait leíró elágazó folyamatok aszimptotikus viselkedésének leírása, a bevándorlást jelentő véletlen változó eloszlására azon feltételek meghatározása, melyek mellett határeloszlás lép fel. Normális és összetett Poisson approximáció.

Összetartási eredmények szemistabilis eloszlások geometriai parciális vonzástartományából vett véletlen változók lineáris kombinációira. Aszimptotikus sorfejtések centralizált és normalizált változók összegére. Határeloszlás-tételek és a kuponygyűjtő probléma. A Gnedenko-Kolmogorov-féle Poisson határeloszlás tétel finomítása. A Szentpétervári Probléma teljes feloldása valószínűségszámítási módszerekkel (Fourier-analízis nélkül).

Az SZTE Bolyai Intézetében folyó oktatás segítése előadások és szemináriumok tartásán, ill. tehetség gondozó szeminárium szervezésén, nemzetközi matematikaversenyeken keresztül.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Klasszikus analízis

Az V. pontban felsorolt tudományos cikkek közül az [1] dolgozat igazolja, hogy klasszikus ortogonális polinomok egy fontos tulajdonsága, az ún. egyenletes zéróhelytávolság fennáll a generáló mértékek egy nagyon általános családjára, nevezetesen az ún. duplázó mértékekre. Az is igazolásra kerül, hogy ez tulajdonképpen ekvivalens is az egyenletes zéróhelytávolsággal (plusz egy, a Christoffel-függvényekre vonatkozó gyenge feltétellel).

Egy kb. 20 éves problémát megoldva a [2] dolgozat pontos aszimptotikát igazol Christoffel függvényekre sima görbék rendszerén mind terület-szerű, mind pedig ív-szerű mértékekre.

Leja pontokat gyakran használnak a numerikus analízisben, és a rájuk épülő módszerek kiváló eredményeket produkálnak, jóllehet a megfelelő elméleti alátámasztás hiányzik. A [3] dolgozat jelentős előrelépést jelent az elméleti megalapozásban, ugyanis igazolja, hogy gyakorlatilag minden esetben a Leja pontokra vonatkozó interpoláció Lebesgue-konstansa szubexponenciális.

Valószínűségszámítás

A [4] cikk tetszőleges súlysorozat esetén definiálja független azonos eloszlású véletlen változók súlyozott összegét, és az így definiált lineáris kombináció aszimptotikus viselkedését vizsgálja az elhanyagolhatósági feltétel mellett. A szerző megmutatja, hogy ha a lineáris kombináció aszimptotikusan normális egy olyan súlysorozat esetén, melyben a súlyok nagyságrendje azonos, akkor a véletlen változók közös eloszlása szükségképpen a normális eloszlás vonzástartományában van.

Differenciálegyenletek

Az [5] dolgozat lépcsősfüggvény-együtthetős differenciálegyenletekről szól, amikor az ugráshelyek közötti távolságok független valószínűségi változók. A szerzők bevezetik és tárgyalják a sztochasztikus parametrikus rezonancia fogalmát.

A Tanganyika-tóban élő különböző viselkedésű ragadozó és zsákmányhalak együttélését leíró nem-autonóm differenciálegyenletrendszer stabilitási tulajdonságait adja meg [6] a határegyenletek módszerével.

Az [7] dolgozat mélyebb betekintést nyújt a Schwarz-derivált alkalmazásaiba, és ezáltal új eredményeket közöl funkcionál-differenciálegyenletek egy olyan családjáról, amelybe a híres Wright-egyenlet és a Mackey-Glas típusú egyenletek is beletartoznak. A szerzők dihotómia eredményeket közölnek, amelyek lehetővé teszik könnyen számítható korlátok megadását a globális attraktorra. A cikk új, nyitott problémákat is megfogalmaz és tárgyalja a témához kapcsolódó sejtéseket.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai hozzájárultak a matematikai ismeretek népszerűsítéséhez, illetve a laikusok tudományos ismeretekhez való jutásához:

- két előadás a Szegedi Szabadegyetem című ismeretterjesztő előadássorozat keretében (*Lehetetlen, avagy hogyan igazolható a lehetetlen?, Matematikával a járványok ellen*), középiskolás szakkör, szakkollégiumi műhely tartásával,
- matematikai érdekességekről vezetett blog (<http://nemlinearis.blog.hu/>),
- médiaszereplések: Klubrádióban, egy helyi televízióban, a Délmagyarország napilapban (http://www.delmagyar.hu/szeged_hirek/matematikaval_a_jarvanyok_ellen/2185360/).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport tagjai 2010-ben 35 előadást tartottak konferenciákon és egyetemi szemináriumokon, köztük a következőkön:

- Workshop on Infinite Divisibility and Branching Random Structures (Guanajuato, Mexikó)
- Harbin Institute of Technology, Hunan University, Hunan Normal University (Changsha, Kína)
- ERC Starting Grant Candidate Presentation, European Commission (Brüsszel, Belgium)
- CAMBAM-MBI Summer School, McGill University (Montréal, Kanada)
- Centre for Disease Modeling seminar, York University (Toronto, Kanada)
- Mathematics in Science and Technology, ICM satellite, Sharda University (New Delhi, India)
- Making It Real Seminar (University of Bristol, UK)
- Hungary-Spain Appl. Math. Miniworkshop, Universidade de Vigo (Vigo, Spanyolország)
- Universidad de Valladolid, (Valladolid, Spanyolország)
- XIIIth International Conference on Approximation (San Antonio, USA)

- I. Jaen Conference on Approximation (Ubeda, Spanyolország)
 - New Perspectives in Univariate and Multivariate Orthogonal Polynomials, Banff International Research Station (Banff, Kanada)
 - Workshop on Graphs and Arithmetic, CRM, (Montreál, Kanada)
 - Workshop on Analytic Number Theory, IAS (Princeton, NJ)
 - Tufts University Sztochasztika szeminárium (Boston, USA)
 - SZTE Természettudományi Doktori Iskolái Tudományos Fóruma (Szeged)
 - Sztochasztika szeminárium illetve Differenciálegyenletek szeminárium (Szeged)
- (a teljes lista megtalálható a www.math.u-szeged.hu/~vasg/mta/eloadasok.html honlapon)

A kutatócsoport egyik tagja szervezte a Szegeden tartott Modellezés az élettudományokban konferenciát.

A SZTE Bolyai Intézettel való együttműködés keretében a tagok kurzusokat tartanak, BSc-s és MSc-s szakdolgozók vannak, a helyi TDK-n I. díjat elnyerő hallgató, illetve doktorandusz hallgatók témavezetői. A kutatócsoport egyik tagja hallgatókat készít fel nemzetközi versenyekre (IMC nemzetközi matematikaverseny, izraeli online matematikai olimpia).

A kutatócsoport tagjainak fordításában megjelent Csörgő Sándor eredetileg angol nyelven írt *Fejezetek a valószínűségelméletből* című tankönyve. Rényi Alfréd *Valószínűségszámítás* című könyve óta ez az első átfogó, magyar nyelvű valószínűségelmélet tankönyv.

A kutatócsoportból egy fő megvédte doktori disszertációját, egy-egy tag Akadémiai Ifjúsági Díjban, Charlotte E. Procter Ösztöndíjban, ill. Deák Ferenc Ösztöndíjban részesült.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport külön nem pályázott más támogatásra. Az ERC Advanced Grant pályázaton *Potential theoretic methods in approximation and orthogonal polynomials* című pályamunkájával 402 000 eurót, az ERC Starting Investigator Grant pályázaton *Delay differential models and transmission dynamics of infectious diseases* című pályamunkájával 800 000 eurót nyert. Kutatócsoporti tagok vesznek részt a Magyarország-Szerbia IPA Határon Átnyúló Együttműködési Program keretében elnyert HU-SRB/0901/221/088 pályázatban a 2010-2011-es időszakban, futó OTKA pályázatokban, illetve két (magyar-spanyol, magyar-kínai) TÉT-pályázatban a 2009-2010-es időszakban.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Mastroianni G, Totik V: Uniform spacing of zeros of orthogonal polynomials. *Constructive Approx.*, 32: 181-192 (2010)
2. Totik V: Christoffel functions on curves and domains. *Transactions of the Amer. Math. Soc.*, 362: 2053-2087 (2010)
3. Taylor R, Totik V: Lebesgue constants for Leja Points. *IMA Journal of Num. Anal.*, 30: 462-486 (2010)
4. Kevei P: A note on asymptotics of linear combinations of iid random variables. *Periodica Mathematica Hungarica*, 60(1): 25-36 (2010)
5. Csörgő S, Hatvani L: Stability properties of solutions of linear second order differential equations with random coefficients. *J. Differential Equations*, 248: 21-49 (2010)
6. Dénes A, Hatvani L, Stacho LL: Eventual stability properties in a non-autonomous model of population dynamics. *Nonlinear Analysis, Theory, Methods & Applications*, 73(3): 650-659 (2010)
7. Liz E, Röst G: Dichotomy results for delay differential equations with negative Schwarzian derivative. *Nonlinear Anal. RWA*, 11(3): 1422-1430 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	3	Ebből kutató ² :	3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			7
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			0
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 1
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 6
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 7
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	9,46	Összes független hivatkozás száma:	32
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	36		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			26
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	7
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	2

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	11,2	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0		
Teljes saját bevétel:	3,6	MFt	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	MFt	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	3,6	MFt	
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:		0	
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0	MFt	
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:		0	
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		0 MFt	

SZTE LÉZERFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Bor Zsolt, az MTA rendes tagja
6720 Szeged, Dóm tér 9.
telefon: 62-544 4273; fax: 62-544 658
e-mail: bor@physx.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Nemzetközi szintű kutatómunka végzése az ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése és a lézerek spektroszkópiai és anyagtudományi alkalmazásai területén.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Lézerek anyagtudományi alkalmazásai

A csoport kutatói megvizsgálták a lézerindukált hátoldali száraz maratás főbb paramétereinek függését a megmunkálandó anyagok termális paramétereitől. Ennek során olyan modellanyagokat választottak, melyek eltérő hőtani jellemzőkkel rendelkeztek. Hőmérsékleti modellszámításokkal megjósolták a hátoldali nedves és száraz maratás legjellemzőbb adatait, s a tapasztalatok szerint jó egyezés állt fenn a kísérleti és a számított eredmények között. Az eredmények hasznosítására a mikrooptikai elemek gyártásában és a mikrofluidikai kutatásokban mutatkozik reális esély. Folytatták ureáz vékonyréteggel kapcsolatos kutatásaikat. A cél olyan réteg lézeres leválasztása, melyet bioszenzor érzékelőként alkalmazva, klinikai diagnosztikában használható eszköz kerülhet kifejlesztésre a jövőben. Kimutatták, hogy a MAPLE eljárással készített ureáz filmek alkalmasak egyes vér paraméterek monitorozására. Az eredmények távlati hasznosítása a diagnosztikában, gyógyításban, orvostudományi kutatásokban történhet. Egy kísérletsorozatban ZnTe kristály KrF excimer lézeres ablációját vizsgálták. Az ablációs egyenlet és a mért maratási sebesség alapján meghatározták a kristály maratási küszöb-energiásűrűségét és abszorpciós együtthatóját 248 nm-re, melyekre irodalmi adat nem állt rendelkezésre. Interferenciás elrendezéssel jó minőségű rácsot is sikerült a minta felszínébe marni. Az elért eredményeket többek között a THz-es spektroszkópia fejlesztésében lehet majd felhasználni. Reaktív impulzuslézeres vékonyréteg leválasztással több fajta (hidrogénezett szilícium, nanostruktúrált szén, szilícium karbid) réteg sorozatot állítottak elő. A rétegek összetételét, a nanostruktúrák méretét, kötősszerkezetét és optikai tulajdonságait többféle módszerrel vizsgálták. Értelmezték a plazmában lejátszódó folyamatok függését a plazma energiától és a háttérgáz nyomásától, és magyarázatot adtak a létrejött rétegek kötősszerkezeti és optikai tulajdonságaira. Az amorf hidrogénezett szilícium egyre inkább alkalmazott anyaga a vékonyréteg napelemeknek, míg a nanoszerkezetű gyémántszerű szén és a szilícium karbid vékonyrétegek elektronikai, tribológiai és orvosi alkalmazása ígéretes.

A témán 7 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa.

Fotoakusztika

Az elmúlt évben folytatták a NitroEurope projektet a bugaci mérőállomáson. Az általuk fejlesztett fotoakusztikus mérőberendezéssel a levegő ammónia koncentrációját, illetve az ammónia fluxusát mérték. Részt vettek a TÁMOP-4.2.2/08/1 „Nemzetközi fotobiológiai interdiszciplináris kutatások környezeti tényezők és genomikaifaktorok interakciójának vizsgálatára, újdiagnosztikus és terápiás eljárások kidolgozására” című projektben. Az emberi bőrből kipárolgó ammónia és metán koncentrációját mérték egy saját építésű fotoakusztikus mérőműszerrel. Sikeresen befejeztek egy K+F projektet a MOL NyRt. részére, melyben a feladat egy olyan berendezés prototípusának kifejlesztése és elkészítése volt, amely alkalmas a

földgáz előkészítésénél alkalmazott etilén-glikolos szárítónál előforduló összes közeg benzol és toluol tartalmának mérésére. Az általuk kifejlesztett négy hullámhosszú fotoakusztikus aeroszol-mérő rendszerrel légköri aeroszolok hullámhosszfüggő optikai abszorpciók együtthatóját mérték terepi körülmények között. Igazolták, hogy bizonyos körülmények között az optikai abszorpciók együttható az UV tartományban anomáliás viselkedést mutat. Kísérletük az első, melynek során valós idejű, gyors felbontású mérésekkel sikerült ezt kimutatni. Várható, hogy a módszer segítségével új távlatok nyílnak meg a légköri aeroszolok vizsgálatában, többek között a valós idejű forrásazonosítás, illetve kémiai összetétel-vizsgálat terén. Hullámhossz-követési eljárást dolgoztak ki, amellyel tovább növelték a repülőgépre telepíthető fotoakusztikus vízgözmérő-rendszerrel végzett mérések megbízhatóságát.

A fotoakusztikai témákon 6 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa. A fotoakusztikus eredmények hasznosításában részt vesz a HILASE Kft is.

Ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése

A kutatócsoport – nem kis mértékben az Extreme Light Infrastructure elnevezésű, Szegeden megépítendő „szuperlézer” központnak köszönhetően – egy újabb kutatási irányban, az attoszekundumos impulzusok keltésének tématerületén is kezdett vizsgálatokat. A magasrendű harmonikusok keltésén alapuló módszerrel a femtoszekundumos lézerimpulzusok kedvező tulajdonságai egy új spektrális tartományra (XUV) terjeszthetők ki. Harmonikusok keltése történhet szabad gáz részecskék optikai ionizációja, vagy szilárd felszínen keltett plazma rezgése révén. Több irányban is végeztek vizsgálatokat. Az XUV impulzusok alakformálásához egy új elrendezést vizsgáltak, mely a femtoszekundumos (látható, közeli infravörös) impulzus alakformáló berendezésekkel analóg, de sűrűlő beesés miatt XUV-ben is alkalmazható. A garchingi Max Planck Institute és a Részecske és Magkutató Intézet munkatársaival kísérletileg vizsgálták, hogyan függ a keltett plazma harmonikusok spektruma, illetve intenzitása a beeső lézernyaláb polarizációs tulajdonságaitól. Ennek jelentősége abban rejlik, hogy a beeső nyaláb polarizációs állapotának változtatásával az attoszekundumos impulzusoknak akár a hossza is kontrollálható lehet.

A terahertzes terek magas-harmonikus keltésre gyakorolt hatását (gáz állapotú esetben) is vizsgálták. A kutatások során a jelenséget egy teljes, nem-adiabatikus, háromdimenziós, numerikus modellel elemezték. Sikerült kimutatni, hogy a lézer és terahertzes tér gázban való terjedése során fellépő változásai jelentősen befolyásolják a magas-harmonikus keltés folyamatát, és bizonyos körülmények között akár elő is segíthetik az izolált attoszekundumos impulzusok keltését. A témán 3 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az év folyamán a kutatócsoport tagjai több olyan rendezvényt szerveztek és előadást tartottak, melyek aktuális tudományos kérdésekkel foglalkoztak ismeretterjesztő szinten. Ennek megfelelően „50 éves a lézer” címmel nagy sikerű előadássorozatot rendeztek. Ehhez az eseményhez kapcsolódóan „Mi jut eszembe a lézer szóról?” rajz- és „A lézer ma és holnap” címmel pedig kutatási pályázatot hirdettek meg általános és középiskolai tanulók részére. Egy kutatójuk „Lézerek az orvostudományban (diagnosztika, szoft-lézer terápia, sebészet), egy szoft-lézer terápiás készülék kifejlesztése” címmel tartott előadást a Magyar Tudomány ünnepe keretében, míg egy másik kutató „Nagy intenzitású - nagyon rövid lézerimpulzusok” címmel tartott előadást a Tudomány Hete kereteiben a szegedi Radnóti Gimnáziumban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport a tavalyi évben közös kutatásokat folytatott a következő hazai partnereivel: SZTE Szemészeti Klinika, Országos Meteorológiai Szolgálat, Pannon Egyetem, Pécsi Tudományegyetem, MTA SzBK, SZFKI, MFA, KFKI releváns kutatócsoportjai, a MOL

NyRt., a Semilab ZRt és a Videoton Holding ZRt. vállalatokkal. A kutatók eredményes munkakapcsolatban álltak/állnak a garchingi Max-Planck-Institut für Quantenoptik, a Forschungszentrum Karlsruhe (Németország), a University of Padova (Olaszország), a Laboratoire d'Optique Appliquée, a Groupe Etude des Lasers Femtosecondes (Palaiseau, Franciaország), az Uppsala University Angstrom Laboratory (Svédország), a National Institute for Lasers, a Plasma and Radiation Physics (Bucharest-Magurele, Romania), valamint a FORTH (Görögország) nemzetközi intézetek kutatóival. A korlátozott terjedelem miatt az elvégzett projektek ismertetése itt nem lehetséges.

A kutatócsoport tagjai az SZTE Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék oktatási feladatainak ellátásában éves szinten mintegy 11 féle tárgyból összesen 364 óra megtartásával vállaltak részt. Továbbá 6 PhD hallgató, 10 diplomamunkát és szakdolgozatot író, valamint 8 tudományos diákköri munkát végző hallgató munkáját irányították.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjainak a tavalyi évben elnyert pályázatai az adott évre vonatkozó támogatási összeggel együtt: „Új kötött szerkezetű, flexibilis vezeték kifejlesztése” K+F ipari szerződés a ContiTech Kft.-vel (1,9 MFt+ÁFA) és TÁMOP-4.2.1/B: Szuperlézer alprogram (22 MFt). A pályázatokkal kapcsolatos feladatok elvégzéséről a II. fejezetben számolnak be.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. György E, Sima F, Mihailescu IN, Smausz T, Hopp B, Predoi D, et al.: „Biomolecular urease thin films grown by laser techniques for blood diagnostic applications”. *Materials Science And Engineering*, 537-541 (2010)
2. Hopp B, Smausz T, Nógrádi A: „Absorbing-Film Assisted Laser Induced Forward Transfer of Sensitive Biological Subjects”. In: Ringeisen BR, Spargo BJ, PK (szerk.) *Cell and Organ Printing book*. Landes Bioscience - Springer Science+Business Media, 115-133 (2010)
3. Hanyecz I, Budai J, Oszko A, Szilagyi E, Tóth Z: „Room temperature pulsed laser deposition of Si (x) C thin films in different compositions.” *Applied Physics A - Materials Science & Processing*, (4): 1115-1121 (2010)
4. Hanyecz V, Mohácsi Á, Pogány A, Varga A, Bozóki Z, Kovács I, Szabó G: „Multi-component photoacoustic gas analyzer for industrial applications.” *Vibrational Spectroscopy*, (52): 63-68 (2010)
5. Pogány A, Mohácsi Á, Jones SK, Nemitz E, Varga A, Bozóki Z, et al.: „Evaluation of a diode laser based photoacoustic instrument combined with preconcentration sampling for measuring surface-atmosphere exchange of ammonia with the aerodynamic gradient method.” *Atmospheric Environment*, 44:(12) 1490-1496 (2010)
6. Ajtai T, Filep Á, Kecskeméti G, Hopp B, Bozóki Z, Szabó G: „Wavelength dependent mass-specific optical absorption coefficients of laser generated coal aerosols determined from multi-wavelength photoacoustic measurements.” *Applied Physics A - Materials Science & Processing* (2010)
7. Ajtai T, Filep Á, Schnaiter M, Linke C, Vragel M, Bozóki Z: „A novel multi-wavelength photoacoustic spectrometer for the measurement of the UV-vis-NIR spectral absorption coefficient of atmospheric aerosols.” *Journal of Aerosol Science*, (41): 1020-1029 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	7	Ebből kutató ² :	3,5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			23
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			13
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>Ebből</i> impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 6
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 2
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	25,34	Összes független hivatkozás száma:	208
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	231		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			5
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	8	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	6

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	34,4	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	55,2 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:			0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	28,5 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:			0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			26,7 MFt

SZTE MESTERSÉGES INTELLIGENCIA KUTATÓCSOPORT

Csirik János, az MTA doktora
6720 Szeged, Tisza Lajos krt. 103.
telefon: 62-544 126; fax: 62-546 737, e-mail: csirik@inf.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A csoport kutatási témakörei alapvetően nem változtak az előző évekhez képest. A fő irányt továbbra is a nyelvtechnológiai kutatás-fejlesztés jelentette. E téren a kutatócsoport dolgozói hangsúlyos szerepet vállaltak a befogadó intézmény, az SZTE Informatikai Tanszékcsoportja által elnyert nagy volumenű pályázatok feladatainak megvalósításában. Egy EU-s pályázatban való részvételnek köszönhetően a csoport önszervező rendszerek terén végzett kutatási tevékenysége jelentősen erősödött. Folytatódtak a beszédfelismerés terén végzett kutatások, melyeket egy TÁMOP projekt is támogatott. A gépi tanulás elmélete és alkalmazásai témakörében korábban megkezdett kutatási tevékenységek is új eredményekhez vezettek.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Természetes nyelvi feldolgozás

2010-ben befejeződött a Szeged Treebank dependenciaformátumra történő átalakítása, aminek a magyar nyelvű dependenciaelemző elkészítésében lesz fontos szerepe. A Szeged Korpusz kibővítésre került néprajzi témájú szövegekkel, a Szeged Treebank és a SzegedParalell korpusz egy része pedig a többszavas kifejezések kezelését támogató címkézést kapott. A magyar nyelvű nyelvtechnológiai kutatás-fejlesztés támogatása céljából fejlesztette ki a csoport a „magyarlánc” nevű programcsomagot, mely magyar szövegek szegmentálására, morfológiai elemzésére és szófaji egyértelműsítésére szolgál. Az adatbázisok és elemzők elkészítését a MASZEKER kódnevű pályázat támogatta. Az automatikus kulcsszókinyerés témakörben a csoport kutatói jó eredményt értek el a SemEval-2 versenyen (angol szövegeken), és elkezdték a rendszer magyar nyelvre adaptálását is. A webbányászat területén a csoport célja Internetről nyert adatok alapján kutatók és kutatási témák összekapcsolása, aminek nehézsége, hogy egy nevet többen is viselhetnek. A csoport kifejlesztett egy rendszert: jelentés-egyértelműsítési módszerekkel automatikusan párosítja az embereket honlapjaikkal. A biológiai információkinyerés egyik célja biológiai névelemek és a köztük rejlő relációk felismerése, amit megnehezít a névelemek, főleg a gènevek többértelműsége. E probléma megoldására létrehozott rendszerük a gèneveket normalizálja taxonomikus információk segítségével. A döntéshozást támogató keretrendszer létrehozását célzó Textrend pályázatban 2010-ben az elemző eszközök rendszerbe integrálása valósult meg, és kutatások folytak dokumentumok automatikus kulcsszavazása, témakövetése és címkefelhő-vizualizáció témákban. A BELAMI projektben doménadaptációs modellek kutatásán volt a hangsúly, amelyek növelik a pontosságot eltérő eloszlású tanító- és tesztelőadatok esetén. Kidolgoztak egy új, modelltranszformáción alapuló algoritmust a doménadaptációs problémára. 2010-ben a csoport munkatársai nyerték el a CoNLL nemzetközi konferencia „*Learning to detect hedges and their scope in natural language text*” versenyfeladatának szervezési jogát, a konferenciakötet szerkesztését és a konferencia vonatkozó szekcióinak lebonyolítását. A csoport kutatói rendezték a Magyar Számítógépes Nyelvészeti Konferenciát is. Részt vettek a Nyelv- és Beszédtechnológiai Platform munkájában, ahol kidolgozásra került egy stratégiai jövőkép és egy megvalósítási terv a terület kutatásainak összehangolására. Az említett projektek mind ipari partnerekkel folynak, így gazdasági hasznosításuk garantált.

Beszédfelismerés

A 2010-es kutatások irányát alapvetően a TÁMOP-4.2.2. pályázat feladatai szabták meg. A vezeték nélküli szenzorokon végzett beszédfelismerés segítésére kis műveletigényű

jelfeldolgozási és hangtömörítési algoritmusokat vizsgáltak a csoport kutatói. Kifejlesztettek továbbá egy, a standard technikáknál zajtűrőbb jellemzőkinyerési algoritmust. E módszerekre építve kulcsszó-detektálási kísérletek indultak szenzorokkal rögzített beszédjeleken. A kulcsszókeresési tesztek későbbi kiterjesztése céljából elkészült egy híradófelvételekből álló 28 órás adatbázis, amely jelenleg a legnagyobb magyar nyelvű beszédtechnológiai adatbázis. A kidolgozott módszerek lehetővé teszik audiovizuális archívumokban (pl. NAVA) hang alapján történő keresést, így alkalmazásuk hozzájárulhat a nemzeti kulturális örökség megőrzéséhez. Ehhez és egyéb alkalmazásokhoz az ipari partnerek keresése folyamatban van.

Mintafelismerés és gépi tanulás

A csoport folytatta a „commonsense reasoning” témakörben folyó kutatásait, melyek célja a „belief revision” hatékonyan kezelhető Horn-formulákra való alapozása. A csoport kutatóinak legújabb eredményei összekapcsolják a témakör legújabb publikációit korábbi saját eredményeikkel és azok általánosításával. A csoport kutatói emellett foglalkoztak a Horn-formulák minimalizálásának kérdésével is, és publikálták az első erre vonatkozó approximálhatatlansági eredményt, valamint egy ehhez használt gráfelméleti lemmához kapcsolódó eredményt. Új eredményeket értek el továbbá a genetikusan optimalizálásában is. Bebizonyították továbbá, hogy a zajos környezetben való tanulás ún. Statistical Query modellje ekvivalens az ún. Honest SQ modellel. A csoport munkatársai publikálták továbbá az AdaBoost.MH tanuló algoritmus egy kiterjesztését, amely az eredeti algoritmusnál szignifikánsan gyorsabban tanul. Ezen felül az új módszer két alkalmazását is bemutatták, egyrészt ujjlenyomat-osztályozásban, másrészt a „ranking” témakörében. Az új felgyorsított módszert magába foglaló programcsomagot ingyenesen letölthetővé tették.

Önszervező rendszerek

2010-ben a csoport kutatásai a P2P-hálózatok modellezésére és elosztott ajánlóalgoritmusok kifejlesztésére fókuszáltak. A csoport kutatói a modellezés során a BitTorrent-közösségek hálózati eszközökre való hatását vizsgálták, mérések révén feltérképezték a hálózati eszközöknek a hálózati folyamatok számára vonatkozó toleranciáját. A mérések alapján modellezték a BitTorrent-közösségek okozta terhelést, megmutatták, a hálózat meglepő érzékenységet a BitTorrent-forgalom növekedésére. Foglalkoztak a BitTorrent-közösségek modellezésével is, valamint tanulmányozták az elérhető és nem elérhető kliensek viselkedésének különbségeit. Az elosztott ajánlórendszerekkel kapcsolatban ismert és új implementációs protokollokat elemeztek számítógépes szimuláció segítségével. Azt találták, hogy a felhasználói értékítéleteket tartalmazó adatbázisokban az objektumok hasonlósági struktúrája nagyon kiegyenlítetlen, és ritka adatbázisokra közel hatványfüggvény-eloszlást követ. Megvizsgálták annak lehetőségét, hogy az ajánlóalgoritmusok tanításához a felhasználói viselkedésből következtessünk a felhasználó értékítéleteire, mely munkájukért az IEEE COPS 2010 workshop legjobb cikk díját nyerték el. A Qlectives pályázat keretében elosztott ajánlóalgoritmusok hatékonyságát és skálázhatóságát vizsgálták a csoport kutatói P2P-hálózatokban. Fejlesztés terén a QScience nevű web 2.0 platform fejlesztésében játszottak fontos szerepet a csoport dolgozói, továbbá a Drupal webfejlesztő környezet segítségével implementálták az EconoPhysics Forum teljes funkcionalitását.

Mesterséges intelligencia a szoftvermérnökségben

A csoport kutatói a negyedik generációs nyelvek szoftverminőségi ellenőrzéséhez Magic nyelven írt adatintenzív rendszerek minőségbiztosítására és rendszerarchitektúrájának feltárására alkalmas eszközöket dolgoztak ki. A komplex események feldolgozása (CEP) témakörben elkészítettek egy gépi tanuláson alapuló predikciós képességekkel bíró eseményfeldolgozó rendszert. Kutatásokat végeztek a statikus Execute After és Before relációkkal kapcsolatosan, melyek képesek közelítőleg meghatározni egy változtatás hatását a forráskódban, ily módon segítve a hatáselemzést. Megvizsgálták, hogy a módszer mennyire pontos a statikus programszeleltetéshez képest, és hogy más hatásanalízis technikákkal összevetve mennyire segítheti a programozók mindennapi munkáját.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport részt vesz a Nyelv- és Beszédtechnológiai Platform munkájában, melynek egyik feladata a nyelvtechnológia nagyközönség felé való bemutatása és népszerűsítése. A szervezet évente – így 2010-ben is – tartott konferenciákat, ahol a tagszervezetek, így a kutatócsoport is bemutatta legfrissebb eredményeit. E konferenciák a nagyközönség számára nyitottak, valamint újságírók és állami döntéshozók is meghívást kaptak, alapvetően a tudomány és társadalom közti párbeszéd erősítése céljából. A platform szervezésében készül egy ismeretterjesztő nyelvtechnológiai előadás az újjáindult Mindentudás Egyeteme sorozatban, valamint egy televíziós kerekasztal-beszélgetés, melyen a csoport kutatói is részt fognak venni.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Önszervező rendszerek: kutatócserés együttműködés a Delft Univ. of Technology, az Univ. de Almería, ETH Zürich és a Univ. of Fribourg egyetemekkel.

Gépi tanulás: új együttműködés indult a Technische Universität Berlinnel.

Nyelvtechnológia: a csoport munkatársai nyerték el a CoNLL konferenciához kapcsolódó versenyfeladat szervezését, és a konferenciakötetet is ők szerkesztették.

Konferenciaszervezés: SASO 2010 nemzetközi konferencia, Magyar Számítógépes Nyelvészeti Konferencia.

Oktatás és témavezetés doktori iskolában: 3 fő.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2010-ben a kutatócsoport dolgozói újabb nagy volumenű pályázatot nem adtak be. Az egyes folyamatban lévő pályázatokban elért eredményekről témaköri lebontásban a II. pontban olvasható beszámoló. Kisebb új pályázatként a csoport egy kutatója bilaterális, projekt alapú kutatócserére épülő DAAD pályázatot nyert a Ruhr-Universität Bochum kutatóival.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Simon HU, Szörényi B: One-inclusion Hypergraph Density Revisited. Information Processing Letters, 110(8-9): 341-344 (2010)
2. Mubayi D, Turán Gy: Finding bipartite graphs efficiently. Information Processing Letters, 110: 174-177 (2010)
3. Sloan RH, Szörényi B, Turán Gy: Learning Boolean functions with queries. In: Crama, Y, Hammer PL (eds.): Boolean Models and Methods in Mathematics. Computer Science and Engineering. Cambridge University Press, 221-256 (2010)
4. Farkas R, Vincze V, Móra Gy, Csirik J, Szarvas Gy: The CoNLL-2010 Shared Task: Learning to Detect Hedges and their Scope in Natural Language Text. Proc. of Computational Natural Language Learning (CoNLL-2010): Shared Task, 1-12 (2010)
5. Vincze V, Csirik J: Hungarian Corpus of Light Verb Constructions. Proceedings of COLING 2010, 1110-1118 (2010)
6. Vincze V, Szauter D, Almási A, Móra Gy, Alexin Z, Csirik J: Hungarian Dependency Treebank. Proc. of Language Resources and Evaluation (LREC 2010), 1855-1862 (2010)
7. Ormándi R, Hegedűs I, Jelasity M: Overlay management for fully distributed user-based collaborative filtering. Proc. of Euro-Par 2010, 446-457 (2010)
8. Busa-Fekete R, Kégl B: Fast boosting using adversarial bandits. Proc. of International Conference on Machine Learning (ICML 2010), 143-150 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	7,5	Ebből kutató ² :	6,5
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	48		
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :	48		
Tanulmány, cikk ⁷ <i> hazai</i> tud. folyóiratban magyarul:	0	idegen nyelven:	1
<i> külföldi</i> folyóiratban magyarul:	0	idegen nyelven:	4
<i> Ebből</i> impaktfakt. publ, térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	3
Könyv ⁸ magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹ magyarul:	0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	2,38	Összes független hivatkozás száma:	176
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	187		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	2	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :	22		
	posztterek száma:	9	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :	7		
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	7	PhD:	6

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	26,2	MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	0 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			4
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

SZTE SZTEREOKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Fülöp Ferenc, az MTA levelező tagja
6720 Szeged, Eötvös u. 6.
telefon: 62-545 564; fax: 62-545 705
e-mail: fulop@pharm.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatócsoport 2010-ben is folytatta a tervezett aszimmetrikus szintézisek újabb feladatainak kutatását, a reakciók sztereokémiájának és mechanizmusának vizsgálatát. A folyamatosan végzett kutatási eredményekből 2010-ben összesen 24 közlemény jelent meg nemzetközi elismertségű folyóiratokban. Ezek a közlemények főként a gyógyszerkémia, az enzimkatalízis, valamint az enantioszelektív heterogén katalitikus hidrogénezés újabb eredményeit ismertetik. A kutatócsoport bekapcsolódott a fumonizin típusú mikotoxinok sztereokémiájának vizsgálata terén folyó kutatásokba is.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

β -Aminosav enantiomerek szintézise során végzett szisztematikus munkánkat folytatva nagyszámú regio- és diasztereoselektív transzformációt végeztek ciklusos aminosavakon. A *Burkholderia cepacia* kiváló enzimnek bizonyult például az (*R*)-3-amino-3-(2,4,5-trifluorfenil)butánkarbonsav, egy új típusú antidiabetikum, a sitagliptin intermedierjének szintézisére. Ezt az aminosavat jó enantiomer felesleggel és hozammal nyerték.

A Staudinger reakcióval nyert 4-aril-2*H*-1,3-benzotiazinok diklór- β -laktám gyűrűje kiválóan alkalmas anyag a 4-aril-2*H*-1,3-benzotiazin-1,1-dioxidok szintézisére. Az 1,1-diklóracetato[2,1-*c*][1,3]-benzotiazin-2-onok tiazingyűrűje szelektíven visszaalakítható és így az új 4-aril-2*H*-1,3-benzotiazin-1,1-dioxidok új stratégiával hatékonyan állíthatók elő.

Új egyszerű utat fejlesztettek új azepánvázis β -aminosavészterek szintézisére. A szintézisút biciklusos β -laktámból kiindulva, az olefin dihidroxilálásán, majd ezt követő erélyes oxidatív gyűrűfelnyíláson, és redukív aminálást követő gyűrűzáráson alapszik. Az eljárás segítségével új, régióizomer 5-aminoazepan-4-karboxilát és 3-aminoazepan-4-karboxilát izomereket nyertek.

A prokirális (E)-2,3-difenil-propénsavak Cl-, F-, MeO-csoportokat tartalmazó származékainak cinkona alkaloidokkal módosított Pd/Al-királis katalizátorokkal végzett hidrogénezésében kiemelkedően magas (95-97%) enantioszelektivitásokkal lehetett előállítani a megfelelő propénsavakat. E vegyületek hasznosíthatók egyes királis gyógyszerek előállításában. A fenti szubsztituenseket tartalmazó vegyületek hidrogénezésének vizsgálata egyúttal a folyamat mechanizmusára vonatkozó újabb jelenségek (a molekulák felületi adszorpciója, a királis indukció irányának váratlan megváltozása) felismerését tette lehetővé.

A 2,2,2-trifluoroacetofenon cinkona alkaloidokkal módosított Pt/Al-királis katalizátorokon történő hidrogénezését átáramlásos, állóágyas, folyamatos rendszerű reaktorban tanulmányozták. Az új eredmények az aktivált ketonok hidrogénezésének eddig sokat vizsgált mechanizmus két fő jelenségének megismeréséhez (sebességnövekedés és a királis indukció

eredete) jelent új kísérleti megfigyeléseket. Igazolták az enantioszelektivitásért felelős intermedier komplex kísérleti körülményektől is függő szerkezetének változatosságát.

Kutatási együttműködés során résztvettek az eddig ismeretlen szerkezetű mikotoxinok, a 3 acilcsoportot tartalmazó fumonizinek azonosításában. A Chemical Reviews-ben jelentettek meg egy általános érdeklődést kiváltó összefoglaló tanulmányt a váratlan inverzióval járó királis reakciókról.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az előállított új vegyületek a szintetikus szerves vegyiparban és különösen a gyógyszeriparban fontos többfunkciós királis biofor építőelemek előállítását jelenthetik. Az együttműködésben elért kutatási eredményekből egy újabb szabadalmi bejelentés történt (ld. V. fejezet).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A kutatócsoport továbbra is szoros kapcsolatot ápol a potsdami egyetem kémiai intézetével, bilaterális együttműködés keretében 2010-2011 időszakra MÖB-DAAD közös kutatócsere pályázatot nyertek. A kutatócsoport néhány tagja részt vesz a Gyógyszerkémiai - és a Szerves Kémiai - tanszékeken folyó oktató munkában: projektmunkák irányításában, valamint a doktori képzésben.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport kutatásait az Országos Tudományos Kutatási Alap támogatta (K72065, K75433, NK81371).

Sikeres Baros Gábor pályázatot nyertek az MTA-SZTE Keringésfarmakológiai Kutatócsoporttal közösen: Aritmiák és szívelégtelenség kezelésére alkalmas Na⁺/Ca²⁺ kicserélő gátlószerek szintézise és gyógyszerjelöltté fejlesztése (2010.06.01-2012.05.31.).

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kazi B, Kiss L, Forró E, Fülöp F: Synthesis of orthogonally protected azepane β -amino ester enantiomers. *Tetrahedron Lett.*, 51: 82-85 (2010)
2. Tasnádi G, Forró E, Fülöp F: Improved enzymatic syntheses of valuable β -arylalkyl- β -amino acid enantiomers. *Org. Biomol. Chem.*, 8: 793-799 (2010)
3. Csomós P, Fodor L, Csámpai A, Sohár P: Exceptional isolation of both imine and enamine desmotropes of 4,1-benzothiazepines. *Tetrahedron*, 66: 3207-3213 (2010)
4. Kiss L, Fülöp F: Selective syntheses of functionalized cyclic β -amino acids via transformation of the ring C-C double bonds. *Synlett*, 9: 1302-1314 (2010)
5. Szőllősi Gy, Cserényi Sz, Bartók M: Novel Evidence on the Role of the Nucleophilic Intermediate Complex in the Orito-Reaction: Unexpected Inversion in the

Enantioselective Hydrogenation of 2,2,2-Trifluoroacetophenone on Pt-Cinchona Chiral Catalyst Using Continuous-Flow Fixed-Bed Reactor. *Catal. Lett.*, 134: 264-269 (2010)

6. Bartók M: Unexpected Inversions in Asymmetric Reactions: Reactions with Chiral Metal Complexes, Chiral Organocatalysts and Heterogeneous Chiral Catalysts. *Chem. Rev.*, 110: 1663-1705 (2010)
7. Szóllósi Gy, Cserényi Sz, Bucsí I, Bartók T, Fülöp F, Bartók M: Origin of the rate enhancement and enantiodifferentiation in the heterogeneous enantioselective hydrogenation of 2,2,2-trifluoroacetophenone over Pt/alumina studied in continuous-flow fixed-bed reactor system. *Appl. Catal. A: Gen.*, 382: 263-271 (2010)
8. Szóllósi Gy, Hermán B, Fülöp F, Bartók M: Cinchona methyl ethers as modifiers in the enantioselective hydrogenation of (E)-2,3-diphenylpropenoic acids over Pd catalys. *J. Catal.*, 276: 259-267 (2010)
9. Bartók T, Tölgyesi L, Mesterházy Á, Bartók M, Szécsi Á: Identification of the first fumonisin mycotoxins with three acyl groups by ESI-ITMS and ESI-TOFMS following RP-HPLC separation: palmitoyl, linoleoyl and oleoyl EFB1 fumonisin isomers from a solid culture of *Fusarium verticillioides*. *Food Additives and Contaminants - Part A Chemistry, Analysis, Control, Exposure and Risk Assessment*, 27: 1714-1723 (2010)

Szabadalmi bejelentés:

Vécsei L, Knyihar E, Párdutz Á, Tajti J, Varga H, Vámos E, Toldi J, Fülöp F, Szatmári I, Boros M, Kaszaki J: Kynurenic acid analogues, pharmaceutical compositions containing same and use of said compounds for the treatment of headache *PCT Int. Appl.* (2010), WO 2010128345 A1 20101111 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	5	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			24
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			24
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 24
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 24
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	96,12	Összes független hivatkozás száma:	655
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	1010		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	2	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			3
		posztterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			2
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	1

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :	24,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	
Teljes saját bevétel:	46,5	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		3
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	15,0	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:		0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		2
A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	29,0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:		1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 2,5 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:		0 MFt

SZTE SZUPRAMOLEKULÁRIS ÉS NANOSZERKEZETŰ ANYAGOK KUTATÓCSOPORT

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 2010-ben

Polipeptid aggregátumok neurotoxikus hatását közömbösítő vegyületek tervezése, szintézise és *in vitro* screenelése. A sejten belüli (intranuronális) β -amiloid aggregátumok sejten belüli kölcsönhatásainak vizsgálata. Új gyógyszerjelölt vegyületek vizsgálata a Huntington-kór és az Alzheimer-kór transzgenikus egérmodelljén.

Különböző plazmonikus tulajdonságú arany és ezüst és ötvözet részecskék előállítása, továbbá funkcionálizálása biológiailag aktív anyagokkal (aminosavak, kis molekula tömegű peptidok, proteinek). A felületmódosítás kolloid stabilitásra való hatásának vizsgálata, fiziológiás körülmények között stabil nanorészecske-biomolekula(peptid) konjugátumok kifejlesztése. Biomolekulák (béta-amiloid 1-42 peptid) kapcsolásának megvalósítása funkcionálizált felületű kvarc kristály mikromérlegen (QCM). Lizozim/arany hibrid bionano filmek készítése és szenzorikai vizsgálata. Optikai szenzorként alkalmazható ón-oxid ill. indium-ón-oxid (ITO) vékonyrétegek kifejlesztése.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Sikerült megjavítani a szolubilis β -amiloid (A β) aggregátumok toxikus hatását közömbösítő gyógyszerjelölt vegyületek farmakológiai tulajdonságait (felszívódás, vér-agy gát áthaladás, biológiai felezési idő növelése, molekulaméret csökkentése). A BAM rövidítésű neuroprotektív vegyületsoport szabadalmaztatását kezdték. Bebizonyították, hogy az A β oligomerek közvetlen kölcsönhatásba lépnek a tubulin fehérjékkel és így a mikrotubuláris rendszer összeomlását, közvetve az idegsejtek működésképtelenségét okozzák. Kimutatták, hogy a régóta ismert Zn-keletor hatású ACE-inhibitor, a Perindopril[®] kivédi a neuronok károsodását az Alzheimer-kór egyik transzgenikus egérmodelljén (APPxPS1 törzs). A fenti neuroprotektív vegyületek hatástalannak bizonyultak a Huntington-kór egérmodelljén.

Arany, ezüst és különböző arányú arany-ezüst ötvözet nanorészecskék szintetizáltak, a részecskék felületét aminosavval, peptidokkal (*L*-cisztein, *L*-glutation) és nagyobb fehérjékkel (pl. amiloid- β fragmentumok) funkcionálizálták. Megállapították, hogy a molekulák mérete jelentősen befolyásolja a részecske-aggregátumok szerkezetét. Az arannyal bevont kvarc kristály mikromérleg (QCM) felületére kemisorpcióval tiolsoportot tartalmazó ligandumot (*L*-cisztein, *L*-glutation, lizozim) kapcsoltak és meghatározták a felületigényüket. Az arany felületre közvetlen nem kötődő aminosavak kapcsolását is megvalósították többrétegű aminosav-fehérje rendszerek (pl. avidin-biotin) kialakításán keresztül. Virág alakú arany nanorészecskék képződésének kinetikáját tanulmányozták puffer rendszerben. Megállapították, hogy a részecskék képződése autokatalitikus folyamat. Lehetséges orvosi diagnosztikai alkalmazás céljából változó hosszúság/szélesség arányú arany nanorudakat szintetizáltak. Arany nanorudakkal sikeresen növelték (akár 30 %-al) egyes aminosavak, pl. fenilalanin és triptofán emisszióját. Hibrid, bionano vékonyrétegeket állítottak elő lizozimból és arany nanorészecskékből az elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló (LbL) technikával. A

szenzor mérések alapján megállapították, hogy a készített lizozim/arany rétegek gáz/gőzszenzorként is alkalmazhatóak. Optikai szenzorként alkalmazható transzparens, elektromosan vezető ón-dópolított indium-oxid (indium-ón-oxid, ITO) vékonyrétegeket készítettek polimert tartalmazó nanokristályos indium-ón-hidroxid szolokból dip-coating módszerrel. Hexagonális rendezettségű mezopórusos ón-dioxidot szintetizáltak szol-gél és templát módszer kombinálásával. Kimutatták, hogy a foszforsavas felületkezelés növeli a termikus stabilitást, a felületi összetételtől (P:Sn atomarány) az ón-dioxid szerkezeti paraméterei szignifikánsan függenek.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Előadássorozatot tartottak egyetemi hallgatóknak (SZTE Tanulmányi és Információs Központ) a kóros fehérjeaggregátumok által kiváltott neurodegenerációs betegségekről, elsősorban az Alzheimer-kórról. Közvetlen munkakapcsolatot alakítottak ki magyar gyógyszeripari vállalatokkal, a szabadalommal védhető gyógyszerjelölt vegyületek gyakorlati hasznosítására.

Előadásokat tartottak (SZAB székház, Szeged) a nanotechnológia gyakorlati alkalmazásáról, az új tulajdonságokkal rendelkező nanoszerkezetű anyagok ipari előállítási lehetőségeiről. Megismertették a hallgatósággal a bioszenzorok működését és azok alkalmazását a környezetvédelemben és az orvosi diagnosztikában. Nanomedicina címmel új előadássorozatot hirdettek meg az egyetemi hallgatóknak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

- Kuopioi Egyetem, Finnország: az A β aggregátumok hatásmechanizmusa.
- Universität Saarland, Homburg, Németország: neuroprotekción és lipidek kapcsolata.
- University of Tel Aviv, Izrael: az ApoE szerepe az A β által kiváltott neurodegenerációban.
- Universität Saarland, Homburg, Németország: az A β által kiváltott microglia aktiválás szerepe a neurodegenerációban.
- SZTE, Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék: nemesfémek plazmonikus tulajdonságai.
- Fraunhofer Institute (IFAM) Bremen, Németország: félvezető és szenzorkutatások.
- Geneve, Svájc: biomolekulák interkalációja nanolamellás rendszerekben.
- Department of Optical Sensors, Institute of Photonics and Electronics, Prága, Csehország: felületi plazmon spektroszkópia.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

- TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KONV-2010-000, Kutatóegyetemi Kiválósági Központ létrehozása a Szegedi Tudományegyetemen című projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozású pályázat 2856 MFt, 2010-2011, ebből a kutatócsoportra jut 40 MFt.
- General Electric Hungary Kft (55-1/2010), Magas szilárdanyag-tartalmú katódmassza előállítására alkalmas szuszpenziók reológiai, morfológiai és termoanalitikai vizsgálata. 10 MFt, 2010.

- Magyar-Korea TÉT, Fotooxidációs és ultrahangos eljárások kombinációja ivóvizek és szennyvizek tisztítására. 6,76 MFt, 2010-2011.
- ERA-NET_HU_0_PIMFCS-H, Piezoelektromos anyagok funkcionálítása az élelmiszer biztonsági vizsgálatokhoz. 44,69 MFt, 2010-2012.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szabó T, Hornok V, Schoonheydt RA, Dékány I: Hybrid Langmuir-Blodgett monolayers of graphite oxide nanosheets. *Carbon*, 48: 1676-1680 (2010)
2. Kun R, Kis L, Dékány I: Hydrophobization of bovine serum albumin with cationic surfactants with different hydrophobic chain length. *Colloids and Surfaces B-Biointerfaces*, 79: 61-68 (2010)
3. Kőrösi L, Papp S, Dékány I: A Layered Titanium Phosphate $Ti_2O_3(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ with Rectangular Morphology: Synthesis, Structure, and Cysteamine Intercalation. *Chemistry of Materials*, 22(15): 4356-4363 (2010)
4. Pál E, Hornok V, Sebők D, Majzik A, Dékány I: Optical and structural properties of lysosime/gold hybrid bio-nanofilms prepared by layer-by-layer method. *Colloids and Surfaces B-Biointerfaces*, 79: 276-283 (2010)
5. Majzik A, Fülöp L, Csapó E, Sebők D, Martinek T, Bogár F, Penke B, Dékány I: Functionalisation of gold nanoparticles with amino acids, β -amyloid peptides and fragment. *Colloids And Surfaces B-Biointerfaces*, 81: 235-241 (2010)
6. Sipos E, Kurunczi A, Fehér A, Penke Zs, Fülöp L, Kasza Á, et al.: Intranasal delivery of Human β -amyloid peptide in rats: effective brain targeting. *Cellular and Molecular Neurobiology*, 30: 405-413 (2010)
7. Granic I, Masman MF, Mulder KC, Nijholt IM, Naude PJW, de Haan A, et al.: LPYFD_a neutralizes A β -induced toxicity and memory impairment. *J. Alzheimer Disease*, 19: 991-1005 (2010)
8. Bozsó Zs, Penke B, Simon D, Laczkó I, Juhász G, Szegedi V, et al.: Controlled in situ preparation of A β (1-42) oligomers from the isopeptide "iso-A β (1-42)", physicochemical and biological characterization. *Peptides*, 31: 248-256 (2010)
9. Juhász GJ, Barkóczi B, Vass G, Datki Zs, Hunya Á, Fülöp L, et al.: Controlled in situ preparation of A β (1-42) oligomers from the isopeptide "iso- A β (1-42)", physicochemical and biological characterization. *J. Alzheimer's Dis.*, 19: 1055-67 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	7	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			17
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			17
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven: 17
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven: 17
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven: 0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	45,1	Összes független hivatkozás száma:	571
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	702		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora: 0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			4
	posztterek száma:		11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	1		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	5
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		23,3	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	1,0	Teljes saját bevétel:	196,1 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	22,3	MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	65,2 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	1,0	MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			4
EU forrásból:	4	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	33,6 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			74,0 MFt

SZTE BIOSZERVETLEN KÉMIAI KUTATÓCSOPORT (TÁRSULT TAG)

Kiss Tamás, a kémiai tudomány doktora
6720 Szeged, Dóm tér 7. Postacím: 6701 Szeged, Pf. 440.
telefon: 62-544 337; fax: 62-420 505
e-mail: tkiss@chem.u-szeged.hu
honlap: <http://www.staff.u-szeged.hu/inorg/indexh.html>

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

Fém-kelátoroknak széleskörű alkalmazása, akár mint egy adott fémiont a szervezetbe terápiás céllal juttató vegyületek, akár mint betegségek diagnosztizálását vagy gyógyítását szolgáló fémionok szállítását végző kelátorok vagy szenzorok.

A neurodegeneratív betegségekben, diabetesben, a rák kezelésében és a Duchenne-féle izomdisztrófiában potenciálisan felhasználható fémionokra alapozott terápiás szereket, vanádium(IV,V), réz(II), cink(II), ruténium(II,III), vas(III), alumínium(III) komplexeket állítsanak elő és azok kölcsönhatásait vizsgálják a biológiai rendszerekben, az aktuális előfordulásuk (biospeciációjuk), a szervezetben való lehetséges átalakulásaik és biológiai hatásuk megismerése céljából.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A neurodegeneratív betegségekben potenciálisan felhasználható fémionokra alapozott terápiás szerek kifejlesztése

Megállapították, hogy a ZnT3 idegsejt transzporter fehérjén a fémion-megkötés feltehetőleg az N-terminális kötőhelyen valósul meg.

Két specifikus Al(III) és Fe(III) kelátor kölcsönhatását vizsgálták a szérumfehérje albuminnal és meghatározták a kötési paramétereket.

Inzulin vércukorszint szabályzó hatását utánaozni képes egyszerű vanádium(IV,V) és cink(II) vegyületek vizsgálata

Mind az oxovanádium(IV)- illetve dioxovanádium(V) potenciálisan antidiabetikus komplexek modellszámításokon alapuló biospeciációjára alapján kijelenthető, hogy a vanádium a komplexek aktív metabolitja, a ligandumra csak a felszívódás elősegítése ($V^{IV}O$), esetleg a toxicitás csökkentése (V^V) érdekében van szükség.

Rákellenes hatású ruténium(II,III), vanádium(IV) és réz(II) komplexek vizsgálata

Spektrofotometriás vizsgálatok alapján meghatározták két polidentát N-donor ligandum 3d fémionokkal vizes közegben képzett komplexeinek stabilitási állandóját.

Fémkomplexek katalitikus hatásán alapuló gyógymód genetikai hibák korrekciója révén

A Colicin E7 nukleáz doménjét az N-terminális részen módosított mutánsokon keresztül vizsgálták. Megállapították, hogy mely aminosavak szükségesek a nukleáz domén működéséhez, illetve a DNS-kötéshez, valamint a C-terminális rész fémion-megkötéséhez. Ezáltal közelebb jutottak az allosztérikus szabályozás megvalósításának lehetőségéhez egy mesterséges nukleázban.

Az eredmények ezen biológiailag aktív molekulák hatásmechanizmusának felderítésében hasznosulnak.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Eredményeiket igyekeznek a társadalom tudomány iránt érdeklődő rétegei számára is megismerhetővé tenni. Éppen most van készülöben a Délmagyarország napilapban megjelenő 'Tudomány és innováció' sorozatban munkájukat népszerűsítő riport készítése. Eddigi tevékenységük inkább a szakmai közvélemény körében való népszerűsítés terén folyt. A kutatócsoport vezetője 2010-ben előadást tartott a Kémia-tanári Konferencián 'Fém-tartalmú komplexek gyógyászati alkalmazása' címmel, illetve Budapesten az MKE és a TIT közös szervezésében a József Attila Szabadegyetemen. Mint a Magyar Kémikusok Lapja felelős szerkesztője folyamatosan törekszik a kutatási eredmények (saját kutatási eredményeik is) szakmai népszerűsítő formában való terjesztésére.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

Egy új COST Akció „Metal complexation in the diagnosis and cure of human diseases: importance and role of thermodynamic studies” szervezésével (11 ország 42 résztvevő) járó aktivitásukat sajnos még nem koronázta teljes siker; 2009 után a projekt 2010-ben is a szóbeli meghallgatáson elbukott, most 2011-ben újra a végső megmérettetés előtt áll a feljavított projekt. Széleskörűek a hazai és különösen a nemzetközi kapcsolataik, amit a közleményeik társ-szerzői listája is jelez. Új kapcsolat a bécsi Egyetemen kiépített kétoldalú egyezményrel is megerősített együttműködés. Az együttműködés anyagi háttérének biztosítására egy Tét pályázatuk van folyamatban. Átmenetileg külföldön (Frankfurtban, Koppenhágában és Zürichben) levő munkatársaik hazahívására terveznek új kutatócsoporti pályázat beadását, remélik sikerrel.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Sikeresen vettek részt az SZTE Kutatóegyetemi címéhez kapcsolódó TÁMOP pályázatán és önálló finanszírozású 2.5 Gyógyhatású fémkomplexek altémában 12 MFt támogatást nyertek el. A csoport kutatásaihoz kapcsolódó, bár attól, a hajdani kutatócsoport anyagi támogatása megszűnte után attól részben függetlenül folyó kutatásokra 'Development of a safe artificial metallo-nuclease zinc-finger, HNH-nuclease, gene therapy' OTKA-NKTH pályázaton egy kolléga 22,7 MFt támogatást nyert el. Az MTA-CNR támogatásával folytatják kutatásaikat a 'Fémionok szerepe a neurodegeneratív betegségekből: modell vizsgálatok a fémionokra alapozott terápiás lehetőségekre' projekt keretén belül 2010-12 között a Padova Egyetem kutatócsoportjával. A III. pontban említett COST Akció jelentősen kiteljesíthetné kutatásaik mobilitási lehetőségeit, de sajnos az igazi áttörést egy EU-s pályázat sikere jelentené, amihez viszont kutatásaik gyógyászati alkalmazási háttérének a megteremtése elengedhetetlenül szükséges volna. Ezt eddig csak a rákellenes vegyületek esetén sikerült megteremteni a Bécsi Egyetemmel való kooperáció révén.

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Jakusch T, Dean A, Oncsik T, Bényei ACs, Di Marco V, Kiss T: Vanadate complexes in serum: a speciation modeling study. Dalton Transactions, 39: 212-220 (2010)
2. Lakatos A, Zsigó É, Hollender D, V. Nagy N, Fülöp L, Simon D, Bozsó Zs, Kiss T: Two pyridine derivatives as potential Cu(II) and Zn(II) chelators in therapy for Alzheimer's disease. Dalton Transactions, 39: 1302-1315 (2010)
3. Enyedy ÉA, V. Nagy N, Zsigó É, Kowol CR, Arion VB, Keppler B, Kiss T: Comparative solution equilibrium study of interactions of copper(ii), iron(II) and zinc(II) with triapine (3-aminopyridine-2-carbaldehyde thiosemicarbazone) and related ligands. Eur. J. Inorg. Chem., 1717-1728 (2010)
4. Nikolakis VA, Exarchou V, Jakusch T, Woolins JD, Slawin AMZ, Kiss T, Kabanos TA: Tris-(hydroxyamino)triazines: High-affinity chelating tridentate O,N,O-hydroxylamine ligand for the cis-V(V)-O₂⁺ cation. Dalton Transactions, 39: 9032-9038 (2010)
5. Sakurai H, Katoh A, Kiss T, Jakusch T, Hattori M: Metallo-allixinate complexes with anti-diabetic anti metabolic syndrome activities. Metallomics, 2: 670-682 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport (Társult tag)

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	0	Ebből kutató ² :	0
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			0
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			9
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			9
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<i>külföldi</i> folyóiratban	magyarul: 0	idegen nyelven:	9
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	9
Könyv ⁸	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	29,42	Összes független hivatkozás száma:	245
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	252		
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	1	MTA doktora:
			0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			4
		posztterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			2
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	2
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :			0 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	42,7 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	37,4 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			3
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,3 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4,0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

SZTE REAKCIÓKINETIKAI KUTATÓCSOPORT (TÁRSULT TAG)

Kiss János, az MTA doktora
6720 Szeged, Dóm tér 7.
telefon: 62-544 803; fax: 62-544 106
e-mail: jkiss@chem.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2010-ben

A kutatóegység két egymással szorosan összefüggő témakörben, nevezetesen a felületkémia és heterogén katalízis területén végez kutatásokat. A tématerület kapcsolódik az MTA 2007-2011. évekre meghirdetett téma prioritásaihoz, nevezetesen a kémiai anyagvizsgálat területéhez.

A program elsődleges célja a szénhidrogének és CO₂ értékesebb vegyületekké történő átalakítása, alkánok, alkének és alkil-aromás vegyületek előállítása. Intenzív kutatásokat terveznek az alkoholok hasznosítására: elsősorban üzemanyagként, H₂ forrásként és tüzelőanyag cellában történő alkalmazásra. A reakció optimális feltételeinek megállapítása, a hatásos katalizátorok előállítása a katalizátorok spektroszkópiai jellemzése képezi a kutatás célkitűzését. Figyelmet fordítanak a katalizátorok felületén lejátszódó folyamatokra, valamint a reagensek és a katalizátorok kölcsönhatásának a vizsgálatára.

A katalitikus folyamatok megértése érdekében cél a szilárdtestek, beleértve fém-egy kristályok, orientált felületű oxidok, karbidok, bimetallikus rendszerek szerkezetének, topográfiájának megismerése, ezeken a felületeken végbemenő adszorpciós folyamatok, az adszorbátumok stabilitásának, reakcióképességének tanulmányozása. Nanotechnológiai eljárásokkal kétdimenziós modellkatalizátorokat állítanak elő.

II. A 2010-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A káliummal promotált Au(111) felület nagymértékben aktiválta a CO₂-t és előidézte annak disszociációját. UV fény besugárzás ezt a folyamatot felerősítette. Molekuláris kapcsolókat, cisz-transz átmenteket tanulmányoztak Au(111) felületen. A vizsgálatokat N-benzylidenanilin alapú vegyületen sikeresen végeztek.

Jelentős eredménynek számít, hogy Mo₂C/carbon katalizátoron CO-mentes hidrogént állítottak elő a hangyasav bomlása során.

Elektron- foton- és ion spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-el tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek képződését és fizikai-kémiai sajátosságait egykristály titán-dioxid felületen. Az arany-ródium rendszer estében core-shell szerkezet kialakulását figyeltek meg. Ennek eredményeképpen az arany vált dominánssá a felületen. Hasonló szerkezet alakul ki titanát nanocompozitokon is. STM módszerrel kimutatták, hogy a CO adszorpció hatására a feldurvított Au(111) felület rekonstruálódik.

Mindezek az eredmények energetikai szempontból hasznosíthatók.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2010-ben

A pályázat megnevezése: Francia-magyar bilaterális kooperáció

A pályázati téma megnevezése: Nanolithographia kialakítása STM alkalmazásával

A pályázati téma száma: OMFB 223/2009

A kooperáció 2010. évi munkájának fontosabb eredménye: Hexagonális $\text{Mo}(\text{CO})_6$ réteget mutattak ki STM technikával alacsony hőmérsékleten réz szubsztráton 0,04 nm korrugációval.

Megjelent dolgozat: 1.

IV. A 2010-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

a.) A pályázat megnevezése: OTKA

A pályázati téma megnevezése: Katalitikus gázszenzorikai 2D modellrendszerek

A pályázati téma száma: K69200

A pályázat 2010. évi munkájának fontosabb eredményei: Rh-Au core-shell nano részecskéket állítottak elő PVD módszerrel $\text{TiO}_2(110)$ felületen. A szerkezetet STM es LEIS technikákkal jellemezték.

Megjelent dolgozat: 4

b.) A pályázati megnevezése: OTKA

A pályázati téma megnevezése: Jól definiált, alacsony szimmetriájú felületi szerkezetek előállítás és spektroszkópiai jellemzése

A pályázati téma száma: K81660

A pályázat 2010-ben kezdődött. Megállapították, hogy $\text{TiO}_2(110)$ felületen a Rh-Mo kölcsönhatásakor ötvözet szerkezetet alakul ki.

Publikáció: Két előadás nemzetközi konferencián

V. A 2010-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Farkas AP, Solymosi F: Photolysis of the $\text{CO}_2 + \text{K}/\text{Au}(111)$ system. Journal of Physical Chemistry, C 114: 16979-16982 (2010)
2. Koós Á, Solymosi F: Production of CO-free H_2 by formic acid decomposition over $\text{Mo}_2\text{C}/\text{carbon}$ catalysts. Catalysis Letters, 138: 23-27 (2010)
3. Óvári L, Luo Y, Leyssner F, Haag R, Wolf M, Tegeder P: Adsorption and switching properties of a N-benzylideneaniline based molecular switch on a Au(111) surface. Journal of Chemical Physics, 133: No. 044707 (2010)
4. Hakkel O, Pásztai Z, Berkó A, Frey K, Guzzi L: In *situ* sum frequency generation vibrational spectroscopy study of CO adsorption on Au surfaces promoted by Ar^+ sputtering and FeO_x additives. Catalysis Today, 158: 63-68 (2010)
5. Óvári L, Berkó A, Balázs N, Majzik Z, Kiss J: Formation of Rh-Au core-shell nanoparticles on $\text{TiO}_2(110)$ surface studied by STM and LEIS. Langmuir, 26 (3): 2167-2175 (2010)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2010-ben

A kutatóhely neve: SZTE Reakciókinetikai Kutatócsoport (Társult tag)

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	0	Ebből kutató ² :	0
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			9
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ⁶ :			9
Tanulmány, cikk ⁷ hazai tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
		0	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:
		0	9
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:
		0	9
Könyv ⁸	magyarul:	0	idegen nyelven:
		0	0
Könyvrész, könyvfejezet ⁹	magyarul:	0	idegen nyelven:
		0	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ¹⁰ :	16,36	Összes független hivatkozás száma:	420
Összes hivatkozás száma ¹¹ :	420		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2010-BEN

Tud. fokozat megszerzése ¹² :	PhD:	0	MTA doktora:	0
--	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹³ :	0	külföldi oltalmak száma ¹⁴ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹⁵ :			7
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹⁶ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁷ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	0

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁸ :		0	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁹ :	0	Teljes saját bevétel:	10,2 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	MFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	9,0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
ÚMFT témák száma:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel és támogatás:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma:			1
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1,2 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 MFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási bevétel:			0 MFt

