

**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2012. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI**

I.

Matematika és természettudományok

Budapest
2013

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

Herczeg György
Haranginé Lukács Réka
Redler László
Sugár Éva

Idei Miklós

Tartalomjegyzék

Előszó	5
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések	6
<i>Matematikai és természettudományi kutatóközpontok és intézetek</i>	8
MTA Atommagkutató Intézet	9
Az MTA Atommagkutató Intézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	22
MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont	24
Földrajztudományi Intézet	27
Földtani és Geokémiai Intézet.....	36
Geodéziai és Geofizikai Intézet.....	42
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet	52
Az MTA CSFK főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	62
MTA Energiatudományi Kutatóközpont	69
Atomenergia-kutató Intézet.....	71
Izotópkutató Intézet	81
Az MTA EK főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben.....	93
MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet	98
Az MTA RAMKI főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben.....	112
MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet	114
Az MTA SZTAKI főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben.....	129
MTA Természettudományi Kutatóközpont	131
Anyag- és Környezetkémiai Intézet	138
Enzimológiai Intézet	150
Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet.....	162
Molekuláris Farmakológiai Intézet.....	171
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet	183
Szerves Kémiai Intézet	194
Az MTA TTK főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	202
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont	211
Részecske- és Magfizikai Intézet	214
Szilárdtest-fizikai és Optikai intézet.....	227
Az MTA Wigner FK főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	241
<i>Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok</i>	246
MTA–BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport	247
MTA–BME Irányítástechnikai Kutatócsoport.....	250

MTA–BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport	253
MTA–BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport	256
MTA–BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport	259
MTA–BME Sztochasztika Kutatócsoport	262
MTA–BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport.....	265
MTA–DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport	268
MTA–DE Részecskefizikai Kutatócsoport.....	271
MTA–ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport.....	273
MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport.....	276
MTA–ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport.....	279
MTA–ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport	282
MTA–ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport	285
MTA–ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	288
MTA–ME Anyagtudományi Kutatócsoport	290
MTA–MTM–ELTE Paleontológiai Kutatócsoport	293
MTA–PE Levegőkémiai Kutatócsoport	296
MTA–SZTE Analízis És Sztochasztika Kutatócsoport.....	299
MTA–SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport	302
MTA–SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport	305
MTA–SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport	308
MTA–SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport.....	311
A matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2012-ben	314
<i>Matematikai és természettudományi Lendület-kutatócsoportok</i>	<i>338</i>
MTA–ATOMKI Lendület Rács Kvantum-színdinamika Kutatócsoport.....	339
MTA–CSFK Lendület Exobolygók és Csillagszerkezet Kutatócsoport	340
MTA RAMKI Lendület Kriptográfia Kutatócsoport	342
MTA–Rényi Intézet Lendület Alacsony Dimenziós Topológia Kutatócsoport.....	344
MTA–WIGNER FK Lendület Félvezető Nanoszerkezetek Kutatócsoport.....	346
MTA–Wigner FK Lendület Kvantummérés Kutatócsoport	349
MTA–BME Lendület Egzotikus Kvantumfázisok Kutatócsoport	351
MTA–ELTE Lendület Biofizikai Kutatócsoport	353
MTA–ELTE Lendület Dinoszaurusz Kutatócsoport.....	354
MTA–SZTE Lendület Foldamer Kutatócsoport	357
Az egyetemi Lendület-kutatócsoportok főbb mutatói 2012-ben	359

ELŐSZÓ

E kötet egyike az MTA 2013. május 6-7-i közgyűlésére készült „*Beszámoló a Magyar Tudományos Akadémia kutatóhelyeinek 2012. évi tevékenységéről*” c. előterjesztés mellékleteinek: a három kötet tudományterületek (matematika és természettudományok, élettudományok, humán és társadalomtudományok) szerint mutatja be a szerkezetében megújult kutatóintézet-hálózat (10 kutatóközpont és 5 kutatóintézet) eredményeit, valamint a legalább 1 éve működő akadémiai támogatású kutatócsoportok és egyetemi Lendület-kutatócsoportok munkáját.

A Magyar Tudományos Akadémiáról szóló 1994. évi XL. törvény értelmében az MTA kutatóhelyei évente beszámolnak tevékenységükről.

Az akadémiai kutatóhálózat szerkezeti megújulása (a kutatóintézet-hálózat átszervezése, egyetemi Lendület- és új támogatott kutatócsoportok létrejötte) szükségessé tette a tudományos beszámolási rendszer újragondolását. Az éves beszámolók elkészítése 2013-ban már az új kutatóközpontokon keresztül történt, így a központtá szerveződés a beszámolóban is tükröződik. Ugyanakkor – az összehasonlíthatóság érdekében – egyelőre megőriztük az intézeti beszámolási szintet is.

A támogatott kutatócsoportok beszámolási anyagai és a tudományos beszámoló struktúrája lényegében megegyezik a kutatóintézetekével. Csak attól az 53 kutatócsoporttól kértünk éves számadást, amely 2012. január 1-jétől kezdte meg munkáját (a 2012. július 1-jével indult kutatócsoportoktól nem). Tekintettel arra, hogy a Lendület-kutatócsoportok továbbra is a július 1-jétől a következő év június 30-áig terjedő munkaévről készítenek szakmai jelentést, e beszámolókötetekben ezek csak rövid ismertetéssel szerepelnek.

Újdonság, hogy 2013-tól a publikációs és idézettségi adatokat a Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT) adatbázisából való lekérdezés (és nem önbevallás) alapján közöljük. A pénzügyi adatok a Gazdasági Igazgatóság által kidolgozott új szerkezetben kerülnek bemutatásra.

2012-ről összefoglalóan megállapítható, hogy – a szerkezeti megújulásnak és az ezt elismerő parlamenti költségvetési támogatásnövekedésnek köszönhetően – az új lehetőségek éve volt. 2012 júliusában 21 akadémiai támogatású kutatócsoport és 37 új Lendület-kutatócsoport alakult (a januárban szerveződött 53 támogatott- és 28 Lendület-kutatócsoporton felül). Az akadémiai kutatóintézet-hálózatban 2012-ben – közel egy évtizedes, egyre fokozódó elmaradást némileg enyhítve – 2 Mrd Ft-nyi kutatási infrastruktúra-fejlesztés történt. Jelentős összeg állt rendelkezésre – a főigazgatói, igazgatói pályázatokhoz kapcsolódóan – az új szerkezetű kutatóintézet-hálózat tartalmi megújítására is. A pályázati úton elnyert különféle támogatások hatásáról, azaz arról, hogy az akadémiai kutatóhálózat az új lehetőségekkel hogyan tudott élni, a következő évi beszámolóban tudunk jelentést tenni. Ahogy az új központok beszámolóiból is látható, az intézményvezetők és a munkatársak jelentős erőfeszítéseket tettek a kutatóközpontként való működés feltételeinek megteremtésére. Noha már szinte mindenhol elindult és megerősödött az interdiszciplináris együttműködés, az integráció valódi eredményei egy-két éven belül fognak igazán láthatóvá válni.

A kutatóintézet-hálózat és a kutatócsoport-hálózat 2012. évi beszámolóinak gyűjteményes kötetei az MTA megújult szerkezetű kutatóhálózatának első évi tevékenységéről adnak áttekintést.

Budapest, 2013. április

Németh Tamás
főtitkár

A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

A táblázatban szereplő adatok egy részét a központok, intézetek vagy a csoportok adták meg. A központok, intézetek pénzügyi és létszámadatait a Gazdasági Igazgatóság, a csoportokét pedig a TKI szolgáltatta a pénzügyi beszámolók alapján. A publikációs és idézettségi adatokat a Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT) adatbázisából való lekérdezés (és nem önbevallás) alapján közöljük. Az idézettségi adatok – a nemzetközi gyakorlatra áttérve – a beszámolási évet megelőző évre (most 2011-re) vonatkoznak. 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 2012. 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 tájékoztatásul külön megadjuk azoknak az akadémikusoknak a tényleges számát, akik az intézettel munkaviszonyban nem állnak ugyan, de tudományos munkájuk kapcsolódik az intézet tevékenységéhez.

⁴ Akadémiai fiatal kutatói álláshelyen és egyéb álláshelyen levő 35 év alattiak együtt.

⁵ A publikációk közé sorolhatók mindazon tudományos, oktatási és tudományos ismeretterjesztő publikációk, amelyeket a kutatóhely statisztikai állományi létszámába besorolt munkatársai jelentettek meg a beszámolási évben, és a publikáción szerepel a kutatóhely neve. Az egyes publikációtípusok meghatározásánál az MTMT definícióit vettük alapul (típus_jelleg_besorolás_v3.0).

⁶ A teljes publikációnak tekinthető közleményfajták felsorolása az MTA elnökség doktori határozata (MTA_doktori_határozat -kivonat) alapján:

1. Folyóiratban megjelentek: szakcikk/tanulmány, összefoglaló cikk, rövid közlemény, sokszerzős vagy csoportos szerzőségű közlemény, forráskiadás, recenzió/kritika, műkritika, esszé.
2. Könyvek: szakkönyv, monográfia, kézikönyv, forráskiadás, kritikai kiadás, atlasz.
3. Könyvben megjelent: szaktanulmány, esszé, forráskiadás, recenzió/kritika, műkritika, műtárgyleírás, térkép.
4. Konferenciaközlemény: folyóiratban, könyvben, egyéb konferenciakötetben (általában több mint két oldal).

⁷ A 2012-es összesített impaktfaktorhoz a folyóiratok legutóbbi (2012-ben közzétett, de a 2011-es évre vonatkozó) impaktfaktorát használjuk.

⁸ A kutatóhelyhez rendelt összes eddigi publikációra 2011-ben kapott (a megjelenési év 2011) hivatkozások száma. Nem számít a hivatkozások közé a disszertációkból, általános bibliográfiákból, ismeretterjesztő vagy nem besorolható művekből (vagy szóbeli közlésből) származó hivatkozás. A Kémiai Kutatóközpont négy intézetének hivatkozásait a jelenlegi

TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet adatai között szerepeltetjük, de ez természetesen a korábbi négy intézet összesített hivatkozásainak száma.

⁹ A tárgyévben kiállított oklevelek alapján.

¹⁰ Nemzeti úton megadott oltalmak: szabadalom, formatervezési minta, használati minta, védjegy, földrajzi árujelző, növényfajta-oltalom, kiegészítő oltalmi tanúsítvány.

¹¹ Megadott külföldi oltalmak: hatályosított európai szabadalom, közösségi védjegy, nemzetközi, Madridi Megállapodás szerinti védjegy, közösségi növényfajta-oltalom.

¹² Azokat az előadásokat és poszttereket is ideszámítottuk, amelyek nem jelentek meg konferencia-kiadványban, de dokumentálhatók.

¹³ Itt csak a kormány szintű vagy ezzel ekvivalens országos és nemzetközi, nem megbízási díjért végzett szakpolitikai tanácsadó tevékenységet, bizottsági részvételt soroltuk fel.

¹⁴ 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 2011/2012-es tanév második és a 2012/2013-as tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

¹⁵ A 2012. évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatást csökkentettük a következő tételekkel:

- a központi beruházási támogatás,
- a felújítási és infrastrukturális támogatás,
- a más tárcáktól bármilyen céllal átadott támogatás,
- a pályázati programok támogatása,
- a kutatóhálózati megújítás támogatása

összegével.

¹⁶ 2012. december 31-én az MTA-keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyek száma.

¹⁷ Az ÚMFT-re, az egyéb hazai pályázatokra (ÚSZT, Széll Kálmán terv stb.) és az EU-s pályázatokra kapott bevétel összege.

¹⁸ A tárgyévre vonatkozó kutatási- és egyéb vállalkozási bevétel, valamint minden egyéb, eddig nem szerepelt kutatási és nem kutatási bevétel összege.

**MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONTOK ÉS
KUTATÓINTÉZETEK**

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-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 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Kvantumfizika

A kvantummechanikában egy részecskének a környezetével való kölcsönhatását általában valamilyen $V(x)$ potenciálfüggvénnyel írják le. Emellett gyakran indokolt a közeg hatását helyfüggő effektív tömeggel is figyelembe venni. A Coulomb-potenciálra vonatkozó korábbi eredménytől inspirálva azt találták, hogy a spektrum stabilitása olyan hely- és energiafüggő $m(x,E)$ tömeg esetén valósulhat meg, amely véges koordináta- és energiatarományon negatív értéket vesz fel.

Kvantumkorrelációk vizsgálata során megmutatták, hogy eszközfüggetlen protokollok nem igénylik közös referenciarendszer meglétét, sőt, elegendő számú mérési elrendezés esetén a mérések kalibrálása sem szükséges. Az eredményeket kísérletileg is igazolták, ahol a két foton maximálisan összefonott állapotát integrált optikai hullámvezetőkkel állították elő.

Feltérképeztek kisebb detektorhatékonyságot is toleráló Bell-egyenlőtlenségeket. Kiderült, hogy a kétfelhasználós esethez képest lényeges javulás érhető el, ha négy- vagy ötfelhasználós Greenberger-Horne-Zeilinger-állapotokat alkalmazunk a Bell-tesztben.

Szórási folyamatok leírásánál biztosítani kell a hullámfüggvény korrekt aszimptotikus viselkedését. Numerikus szempontból nagyon fontosak a határfeltételek explicit megadását elkerülő módszerek. A komplex skálázás segítségével ez megtehető. Ismeretes azonban, hogy tisztán Coulomb-kölcsönhatás esetén ez az eljárás nem működik. Ehelyett olyan új eljárást javasoltak, amely kétfest Coulomb-kölcsönhatás esetén megoldást jelent a problémára.

A kvantummechanikai egyrészecske-bázisokba is bevehető nemkötött állapotok közül az antikötött állapotokat tanulmányozták. Kiderült, hogy a pólustrajektóriák erősen függnak a potenciál kicsiny, nem-nulla aszimptotikus részétől, ezért ilyen állapotok előállítására aszimptotikusan szigorúan nulla potenciálokat célszerű használni.

Részecskefizika

Az Atomki kutatói tevékeny részt vállaltak a CERN 2012-es legnagyobb eredményének elérésében, a 125 GeV-es új bozon megfigyelésében. A CERN nagy hadronütköztetőjén folytatott két kísérlet (a CMS-kísérlet és az ATLAS-kísérlet) közül a CMS-kísérlet

detektorának a debreceni csoport által épített és üzemeltetett részén az Atomki kutatói 16 online műszak keretében vettek részt az új bozonra irányuló adatgyűjtésben. Az új bozon az eddigi adatok alapján a Standard Modell Higgs-részecskéjével azonosítható. Az eredmények 2012 során számos cikkben kerültek közlésre [Phys. Rev. Lett: 12, J. High. En. Phys.: 31, Phys. Rev. D:6 és Phys. Lett. B: 23 közlemény].

A kvantumtérelméletben a funkcionális renormálási csoport (RG) módszer alkalmas a nemperturbatív renormálás végrehajtására. Azonban a közelített RG egyenletek függnek a regulátorfüggvény, azaz a renormálási séma megválasztásától is. Szükséges tehát a sémaválasztás optimalizálása. A jelen munkában optimális sémaválasztást biztosító regulátorfüggvényt konstruáltak.

Sikerült kimutatni, hogy a leegyszerűsített modellekben korábban megfigyelt fermion-lokalizáció jelensége magas hőmérsékleten az erős kölcsönhatást leíró kvantum-szindinamikában is fellép. A kvarkspektrumban meghatározták a lokalizált és delokalizált állapotok közötti átmenet, az ún. mobilitási határ helyének hőmérsékletfüggését.

Magfizikai alap kutatás

Szimmetriai-megfontolások alapján megjósolták a ^{28}Si atommag alakizomer-állapotait, vagyis azokat az erősen deformált állapotokat, amelyek különösen stabilak. Az elméleti előrejelzés arra is kiterjedt, hogy ezek az állapotok milyen magreakciókkal állíthatók elő.

A GSI-ben végzett méréseik eredményei alapján új módszert dolgoztak ki az atommagok neutronbőr-vastagságának meghatározására.

Az ^{238}U hasadási valószínűségét és hasadási rezonanciáit vizsgálták a gammaenergia függvényében a Duke Egyetem (USA) nagyenergiás gammanyalábja segítségével. A kísérleti adatok alapján megerősítették a hasadási potenciál harmadik völgyének létezését.

Az Oslói Egyetem gyorsító laboratóriumában megvizsgálták a ^{238}Np ollózó típusú M1 óriásrezonanciáját, és meghatározták a rezonancia erősségeloszlását.

Olasz-magyar együttműködés keretében, Debrecenben végzett kísérlet eredményeképpen meghatározták nagy térfogatú (3"×5") LaBr_3 gammadetektorok hatásfokát és linearitását 18 MeV-ig. Könnyű magok csomósodási jelenségeiről nyertek információt modern LaBr_3 -detektorokkal Debrecenben végzett gamma-gamma koincidenciamérések alapján.

A GSI ESR tárológyűrűje lehetővé tette, hogy kis impulzusmomentum-átadás esetén, speciális proton- és neutrondetektorok segítségével vizsgálják a ^{56}Ni (p,p') és a ^{56}Ni (p,n) reakciókban gerjesztődő különböző óriásrezonanciák erősségeloszlásait és hogy következtethessenek a maganyag eloszlására (neutronbőr vastagságára). A neutronok detektálására a Debrecenben kifejlesztett ELENS neutronspektrométerüket használták.

A radioaktív nyalábokon végzett magszerkezet-kutatások egy csoportja egy már korábban elkezdett téma folytatásaként az extrém proton-neutron aránynál kialakuló héjzáródások feltárására irányult. Az új N=16 héjzáródás jellemzőit a neutronelhullatási vonal mentén fekvő ^{24}O és a protonelhullatási vonal melletti ^{36}Ca izotópokban vizsgálták meg.

A hagyományos mágikus számok eltűnését okozó mechanizmusok feltárására az N=20 mágikus számú neutronnal rendelkező ^{34}Si , az N=28 neutronnal rendelkező ^{44}S és a Z=28 protonszámhoz közeli $^{72,74}\text{Zn}$ atommagokat vizsgálták. Ezekben az atommagokban sikerült az egyszer mágikus jellegnek megfelelő gömbszerű alak mellett deformált alakhoz tartozó állapotok jelenlétét is kimutatni, mely állapotok lesüllyedése vezet a klasszikus mágikus számok eltűnéséhez.

Kutatási programot indítottak a nukleonok effektív kölcsönhatásának vizsgálatára. A nehéz ólom atommagok szerkezetének tanulmányozása kapcsán sikerült megmutatni, hogy a szabad nukleon–nukleon kölcsönhatással szemben a kétnukleon effektív kölcsönhatást egy harmadik nukleon jelenléte hogyan változtatja meg, tehát hogyan kell a háromtest kölcsönhatásokat figyelembe venni.

Alfa-indukált reakciók esetén kísérletileg elsőként igazolták, hogy a reakciócsatornák hatáskeresztmetszeteinek mérése alapján kapott teljes reakció-hatáskeresztmetszet megegyezik a rugalmas szórásból származtatottal.

A ^{104}Pd atommag nagyspinű állapotainak szerkezetét vizsgálták a $^{96}\text{Zr}(^{13}\text{C},5n)$ magreakcióban 51 és 58 MeV nyalábenergián az Euroball IV γ -spektrométer és a DIAMANT töltőttrészecske-detektor felhasználásával. Számos új közepes- és nagyspinű forgási sávot azonosítottak.

A ^{132}La közepes- és nagyspinű állapotait vizsgálták $^{100}\text{Mo}(^{36}\text{S},p3n)$ és $^{116}\text{Cd}(^{23}\text{Na},\alpha3n)$ fúzió-párolgási magreakciókban az Euroball és Gammasphere detektorrendszerekkel. A ^{132}La atommag nívósémáját jelentősen kiterjesztették, és egyértelmű spin és paritás értékeket határoztak meg a legtöbb gerjesztett állapotra. A ^{132}La és ^{134}Pr atommagok között észlelt hasonlóság alapján a ^{132}La atommagban is várható egy sáv, amely királis tulajdonságot mutathat.

A $^{17}\text{O}(p,\alpha)^{18}\text{F}$ reakció alacsonyenergiás hatáskeresztmetszetének nagy pontosságú, két független módszerrel végzett mérésével jelentősen pontosították a nóvarobbanások elemszintézis-modelljeit.

A $^{130,132}\text{Ba}$ és ^{127}I izotópokon alfaindukált reakciók vizsgálatával az asztrofizikai p-folyamat szempontjából fontos statisztikusmodell-számítások megbízhatóságát ellenőrizték, és új reakciósebességeket származtattak.

Részletes háttérsugárzás-mérésekkel bebizonyították, hogy bizonyos feltételekkel kis mélységű földalatti laboratóriumok a mélyen földalatti helyszínek reális alternatíváját nyújtják nukleáris asztrofizikai kutatásokban.

Az asztrofizikai s-folyamathoz szükséges neutronok meghatározó része a $^{13}\text{C}(\alpha,n)^{16}\text{O}$ reakcióban termelődik. E reakció széles, küszöb alatti rezonanciájának erősségét határozták meg az úgynevezett Trójai Faló indirekt technika használatával.

Befejezték az $A=128$ tömegszámhoz tartozó összes ismert nuklid szerkezetére vonatkozó új kísérleti adatok kritikai kiértékelését.

Összegyűjtötték és kritikailag kiértékeltek az $A=46$ tömegszámhoz tartozó összes ismert nuklid szerkezetére vonatkozó új kísérleti adatokat. A kritikai elemzés eredményeként minden nuklid esetén összeállították az elfogadott adatok listáját.

Magfizikai alkalmazások

Négy mérésorozatot végeztek a CHARISMA EU FP7 projekt keretében, összesen 6 külföldi kutatót fogadtak Belgiumból, Lengyelországból, Németországból és Romániából. Vizsgáltak egyiptomi kőbányákból származó mintákat, kora vaskori ékszereket, középkori övcsatokat és textilekben alkalmazott fémszálakat.

Optikai rácsokat és mikrolencsákat készítettek proton és szén mikronyalábos direkt írással. A besugárzások elkészültek, az elkészített optikai eszközök vizsgálata folyamatban van.

Akadémia infrastruktúra-fejlesztési projekt keretében megvalósítottak egy levegőre kihozott mikronyalábos mérő- és adatgyűjtő rendszert az Atomki pásztázó nukleáris mikroszondáján,

amely széles rendszám tartományban ($Z \geq 3$) lehetőséget nyújt elemi összetétel meghatározására néhány száz mikrométeres laterális felbontással.

Deuteronindukált gamma-keltési (d-PIGE) hatáskeresztmetszeteket mértek N-re és Si-ra az IAEA által koordinált „Assessment of Nuclear Data Needs for Particle Induced Gamma Ray Emission (PIGE)” kutatási program keretében.

Kidolgozták a ^{64}Cu és ^{203}Pb orvosi biológiai kísérletekhez való előállításának módszerét, az izotóp alkalmazása az SE és BME munkatársaival együttműködésben történt.

A paksi atomerőmű radioaktív hulladékaiban előforduló, nehezen mérhető béta-sugárzó ^{79}Se radioizotóp radiokémiai kinyerésére kidolgozott módszerüket továbbfejlesztették ^{75}Se nyomjelző alkalmazásával.

Izotópos módszerrel tanulmányozták a réz felületi helyek szerepét cirkónium-oxid hordozón a metanol katalitikus átalakulása során. A ^{12}C - és a ^{11}C -jelzett metanol egymást követő alkalmazása lehetővé teszi a katalitikusan aktív felületek, ezen belül a gyenge és erős kémiai kötések meghatározását.

A töltött részecske-reakciók aktivációs hatáskeresztmetszetének és hozamának vizsgálata keretében új kísérleti adatok meghatározását, elméleti értelmezését, referencia-adatbázisok létrehozását és az adatok gyakorlati alkalmazását végezték el.

A National Institute of Radiological Sciences gyorsítólaboratóriumában (Japán) a ^{64}Cu előállításának lehetőségét a $^{67}\text{Zn}+p$ magreakció segítségével az $E_p < 30$ MeV energiatarományban vizsgálták, a $^{193\text{m},195}\text{Pt}$ előállítását pedig az $^{192}\text{Os}+p$ magreakciók segítségével az $E_p < 60$ MeV energiatarományban.

Tölgyfajok egyedei és hibridek esetén vizsgálták a vízforgalom és a szénallokációs folyamatok közötti kapcsolatot. Egyedülálló idősorokat mértek a Debreceni Egyetem Síkfőkút Project területén a 2012-es év igen száraznak számító tenyészidőszakára vonatkozóan is.

Továbbfejlesztették a kopás-, korrózió- és erózióvizsgálatokra alkalmas izotópokkal történő munkát szabad forgalmi határ alatti aktivitások felhasználásával, együttműködésben az ausztriai AC²T intézettel. Új izotópok használatát vezették be a legáltalánosabb alapanyagokat (Fe, Cu, ...) nem tartalmazó anyagok vizsgálatához (pl. Al, Sn, ...). Az új fejlesztések segítségével eddig nehezen kezelhető kopásvizsgálati problémákat oldottak meg a partnerekkel való együttműködésben.

Nemzetközi együttműködésben méréseket végeztek proton- és deuteronindukált hatáskeresztmetszetek meghatározására különböző céltárgyakon gyorsítótechnológiai és vékonyréteg-aktivációs alkalmazásokhoz.

A PHARMATOM projekt keretében telepítésre kerültek a ^{18}F , valamint a ^{11}C radioizotópok előállítására szolgáló céltárgy-rendszerek. A ^{11}C izotóppal jelzett célvegyületek előállítása után megkezdődött a ^{18}F izotóppal jelzett vegyületek kémiai szintézise.

Atomfizikai alap kutatás

H^0 atomok és protonok nemesgáz-atomokkal való ütközését vizsgálták az Atomki VdG-1 gyorsítóján. A mérésekből arra nyertek információt, hogy milyen szerepet játszik a H^0 lövedék elektronja az ütközés által kiváltott többszörös vakanciaképződési folyamatban.

Kísérleti és elméleti úton vizsgálták az atomi elektronok töltéseloszlásának nagyenergiájú ütközések által kiváltott aszimmetriáját, az ún. beállítódás (alignment) jelenségét. A kísérleteket egy indiai csoport végezte a Bhabha Atomic Research Centre pelletron gyorsítóján 18–60 MeV-es fluor ionokkal történő bombázással. A munkához az Atomki

hozzájárulása elméleti számítások elvégzése volt. Az új kísérleti adatok alátámasztják a használt modell helyességét.

A transzfer-ionizáció folyamatát a kétszeres ionizáció jelenségén keresztül vizsgálták a He-atomok nagyenergiájú X^{q+} lövedékekkel történő ütközéseiben. A kísérleti adatokkal igen jól egyező számításaik alapján megállapították, hogy alacsony ütközési energiákon a lövedék külön-külön kölcsönhatásokban ionizálja és fogja be az elektronokat, nagy ütközési energiákon viszont a legvalószínűbb folyamat az, amikor a lövedék csak az egyik elektronnal lép kölcsönhatásba, míg a másik az alapállapotú és az ún. átrendeződéses elektronkorreláció révén jut el a végállapotba.

A University College London Fizikai Tanszékén folytatták annak a mérőrendszernek a kifejlesztését, amellyel pozitron-atom ütközésekben a meglökött céltárgy-atommag energia- és szögeloszlását tervezik meghatározni.

Elméleti módszerrel tanulmányozták a töltés-kicserélődési reakciót He^+ -ionok nitrogén-monoxid (NO) molekulával történő ütközéseiben, amely mind légköri, mind biofizikai szempontból igen fontos molekula. A $HeNO^+$ kvázi-molekula különböző elektronállapotai közötti nemadiabatikus kölcsönhatások figyelembevételével részletesen vizsgálták a töltés-kicserélődés mechanizmusát. Kimutatták, hogy a céltárgy-molekula orientációját változtatva az ütközési sebesség irányára nézve, a töltéskicserélődés erősen anizotróp.

Metán-, víz- és nitrogénmolekulák azonos sebességű N^+ és N_2^+ lövedékekkel kiváltott szétesését vizsgálva azt tapasztalták, hogy a fragmentumok spektruma mindkét lövedéknél jelentős mértékű háromszoros és négyszeres ionizációra utal. A kétféle lövedékre erősen eltérő szögfüggést találtak, ami új információt ad az ütközés dinamikájáról. A méréseket az Atomki VdG-5 gyorsítójának nyalábcatornáján végezték.

Nemzetközi együttműködés keretében Franciaországban, a GANIL intézetben kis lövedék-energiákon mérték az $OH^+ + Ar$, ill. $O^+ + CH_4$ ütközésekből származó negatív fragmentumok hozamát. Elektrosztatikus analízis után mágneses térrel szétválasztották az elektronokat és anionokat. A mérések egy részét repülési-idő-spektrométerrel megismételve a különböző anionokat is szétválasztották (H-, O-). Az anionok hozamát váratlanul nagynak találták, ami különösen a nagy impulzusátadással járó direkt fragmentáció esetén számít meglepő eredménynek.

Az Atomki ECR-ionforrás plazmájának időbeli változását vizsgálták impulzus üzemmódban a plazma begyűjtésakor és kialszásakor 1000 frame/s-os gyorskamera segítségével. A tranzien állapotok tanulmányozása értékes adatokat adott a nagy töltésű ionok keletkezésének módjáról és helyéről. Az ECR-plazma számítógépes szimulációja során nagyszámú (3 millió) elektron tér- és időbeli fejlődését követték. A megmaradó elektronok energiatartományok szerinti szűrése számos fontos 3D-típusú információt fedett fel.

Különböző technikai és biológiai szempontokból fontos anyag felületének ionnyalábbal történő módosítását végezték. Amerikai partner megbízásából a Debreceni Egyetemmel együttműködésben GeSe kalkogenid mintákat sugároztak be Ar^{8+} nyalábbal. A kísérletsorozat végső célja nanokapcsoló prototípusának megvalósítása. Titánium felületek Au^{9+} nyalábbal történő strukturális módosítását végezték, amelynek célja a felülethez jól kötődő nanoszemcsék létrehozása. Biológiai szempontból fontos cirkónium mintákat Si^{3+} nyalábbal sugároztak be abból a célból, hogy a felület kezelését követően a fogpótlásban hosszabb élettartamú és jobb tapadású implantátumot kapjanak.

Megmérték a Kr 4p fotoelektronok szögeloszlását széles fotonenergia-tartományban ($h\nu=60-120$ eV) a hamburgi DORIS III szinkrotronnál. A vizsgálatok célja az elektromos okkupól kölcsönhatás (E3) kimutatása és energiafüggésének meghatározása volt.

A Justus-Liebig Egyetem (Giessen, Németország) kutatóival együttműködve folytatták egy foton-ion spektrométer installálását a hamburgi PETRA III szinkrotronnál. Elérték, hogy az egymással szembe haladó ion- és fotonnyalábok átfedése jó közelítéssel 100%-os legyen.

Az ELI ALPS rendszer előkísérleteihez befejeződött egy speciális repülésiidő-spektrométer (TOF) fizikai és mechanikai tervezése, kivitelezése és megépítése. A TOF-hoz kifejlesztett elektronoptika $\pm 10^\circ$ -os kúpszög esetén is biztosítja az elektronok detektálását jobb, mint 44 psec-os időszórással 1 m-es repülési távolságnál.

Nagy töltésű neon- és argonionok szigetelő nanokapillárisokon való áthaladásának vizsgálatára végeztek kísérleteket az Atomki ECR ionforrásnál. Az ionok átjutásáért felelős, az ionnyaláb által a kapillárisfalakra lerakott töltések elszivárgását tanulmányozták a nyaláb kikapcsolása után annak gyors, pillanatszerű visszakapcsolásaival. Az első eredmények közvetlenül is mutatják a kapillárisokba lerakódott töltések nemlineáris vezetési karakterisztika szerinti elszivárgását, amely eddig csak elméleti feltevés volt. Vezető-szigetelő multirétegben kialakított kapillárisokat is vizsgáltak ionterelés szempontjából, és azt tapasztalták, hogy feszültséget adva a rétegek közé jó terelőképesség érhető el.

Atomfizikai és szilárdtestfizikai alkalmazások, felületkutatás

Grafén-oxidot állítottak elő grafénlemezekből ózonban és elektronplazmában történő oxidációval. A kémiai összetétel és a C-hibridizáció megállapítására az XPS módszert, a szerkezeti analízisre a REELS (Reflected Electron Energy Loss Spectroscopy) módszert alkalmazták.

XPS és REELS méréseket végeztek felnőtt fogak és gyermek tejfogak metszetein. Az elektron áthaladása során energiát veszít, és az energiavesztési folyamatokban (a folyamatokat tükröző energiavesztési spektrumok alakjából) óriásrezonanciákat fedeztek fel, amelyek a Ca-vegyületekben zajló kollektív gerjesztéseknek tulajdoníthatók. A fogászok által használatos foszforsavas kezelést követően az óriásrezonancia megszűnt. A különbséget a szervesetlen komponensek okozzák. Óriásrezonanciákat találtak a fogászatban használatos fogtömések esetén is.

Egércsontminták felületi és tömbi érzékenységgű analízisét végezték a minták fő- és nyomelem koncentrációjának (és a megfelelő mélységi koncentrációeloszlások) meghatározása végett. Megmutatták, hogy az XPS módszer értékes eszköz nemcsak a fő komponens atomok kémiai állapotának, hanem a relatív koncentrációjuk kvantitatív meghatározására is. A mintákat alkotó fő- és nyomelemek koncentrációját a minták PIXE és SNMS spektrumainak az analíziséből is meghatározták.

Új jelenséget figyeltek meg az elektronok szilárd testek felületéről történő visszaszórásának folyamatában, ennek a jelenségnek megfelelően az elektronok felület feletti, vákuumban elszennvedett energiavesztése és irányváltoztatása (super-surface scattering) jelentős mértékben befolyásolhatja a visszaszórt elektronok spektrumát. Az elektronszórási folyamatok pontos Monte Carlo szimulációja felhasználásával végzett analízis azt mutatja, hogy a „super-surface scattering” lényeges jelenség az elektronspektrumok kvantitatív értelmezése szempontjából.

Dirac-Fock-Slater atomi számolásokat végeztek a 3d átmeneti fémek általuk mért, szinkrotronsugárzással gerjesztett 1s fotoelektron-spektrumaiban jelentkező kísérő csúcsok keletkezési mechanizmusának értelmezéséhez. A kétféle modell (a fotoionizációt követő 3d→4d shake up gerjesztés és a vegyértéksávok részleges átfedése miatti 3d→4s átmenet) közül az utóbbiból kapott eredmények mutatnak jobb egyezést a kísérő csúcs és a fő spektrumvonal energiaszeparációjának kísérleti értékeivel.

Elsőként vizsgálták lassú, nagy töltésű ionok egyedi kapillárisokon történő átvezetésének hőmérsékletfüggését. A terelési folyamat optimalizálásának egyik módja a szigetelő anyag elektromos vezetőképességének megváltoztatása. Az üveg elektromos vezetőképességének erős hőmérsékletfüggése (közel exponenciális függés) a kulcsa a terelési mechanizmus szabályozásának, mely segítségével csökkenthető az átvezetésnek az áramingadozásból következő instabilitása.

Néhányszor 100 eV energiájú pozitronok egyedi kapillárison történő átvezetésének első kísérletei azt mutatják, hogy a pozitronok (elektronok) egy része képes átjutni a kapillárison még akkor is, ha azt a geometria feltételek nem tennék lehetővé. Az átjutott részecskék száma a kapilláris dőlésszögével csökken.

Al₂O₃-kapillárison való elektronátviteli kísérleteiket a makroszkopikus transzportmodellel összevetve eltéréseket találtak a lassú nagy töltésű ionok viselkedéséhez képest. A feltöltődési fázis nem szükséges elektronok esetében ahhoz, hogy átjussanak a kapillárison. A töltésfolt lehet pozitív és negatív is. Az elektronátvitelt a többszörös kisszögű felületi szórások is befolyásolják.

Elsőként vizsgálták 1 MeV-es proton mikronyaláb terelődési mechanizmusát különféle egyedi szigetelő mintákon keresztül, valamint az átjutott protonok energia eloszlását. Az átvitel időfüggésében három jól elkülöníthető tartományt figyeltek meg.

Gázfázisból kémiai leválasztással készített optikailag áteresztő, ugyanakkor elektromosan vezető rétegek szerkezeti tulajdonságait vizsgálták porlasztáson alapuló mélységprofil-analízis módszerrel. Megállapították, hogy a kémiai leválasztással előállított filmek mélységi homogenitása nagyon érzékeny a technológiai folyamatra. Kísérleti adatokat kaptak a mélységi homogenitás utólagos hőkezeléssel történő javítására.

Együttműködés keretében, Barkhausen-zaj méréssel lágy-mágneses anyagokban tanulmányozták a mágneses doménfalak mozgását alacsony hőmérsékleteken. Kalkogénideken lézertűnyel történt besugárzással alacsony hőmérsékletű optikai méréseket végeztek. A fény okozta termikus gerjesztések itt már teljesen kizárhatók, ezért a jelen kísérletekben tisztán tanulmányozhatók a lézertűny által a kalkogénidekben kvantummechanikai módon indukált szerkezeti változások.

Röntgendiffrakciós technikával meghatározták porlasztással készült multirétegek szerkezetét. Ugyanezen technikával szerves kémiai kutatásokban használt és előállított kristályos anyagokat is vizsgáltak. Hazai múzeumok gyűjteményeiből származó régészeti leleteken röntgenfluoreszcencia-vizsgálatokat végeztek.

Szilícium fotoelektron-sokszorozók (SiPM), továbbá az ezekből létrehozott SiPM mátrixok és más összetett egységek elektromos, optikai és nukleáris karakterizálási módszereit dolgozták ki. A kutatás és fejlesztés a jelen fázisában az ST Microelectronics (Catania, Olaszország) cég által kifejlesztett SiPM egységeknek az adott célra történő alkalmazhatóságáról szolgáltat kulcsfontosságú információt. Az optimalizált egységekből hamarosan megépülő kisállat-PET-kamera a radiológyszer-fejlesztési és molekuláris kutatási feladatok megoldásához ad majd segítséget.

GSO és LSO nanoszcintillátorokat készítettek. A méreteloszlást röntgendiffrakcióval vizsgálták, míg az elektronok energiátranzfer folyamatait REELS módszerrel határozták meg. Megállapították, hogy az energiátranzfer méretfüggő.

Nagyfelületű, háromszög geometriájú CsI(Tl) töltött részecske-detektoroknak kisméretű, négyzet alakú fotodiódával történő kiszájú kiolvasásához készítettek fényvezetőket magfizikai kutatások céljára.

Környezetfizika

A K-Ar kronológiai kutatás terén a Kárpátok vonulatát követő intrúzív testek szerepét tisztázták a neogén-kvarter mészkalkáli vulkanizmus fejlődéstörténetében. Szlovák-magyar és magyar-román együttműködés keretében a Keleti és Nyugati Kárpátokban folytak vizsgálatok, a lengyel-magyar együttműködés keretében pedig a korábbi antarktisi mérési eredmények kiértékelésére került sor.

Mélyégi és kiömlési magmás kőzetek kronológiai vizsgálata folyt a Cseh Masszívum területén, valamint összefoglalták a fiatal bazaltokon mért K-Ar korok hibalehetőségeit. A talajok agyagásványain mérhető formális K-Ar koroknak a (mű)trágyázás és a növényzet hatására történő változását analizálták.

A Hertelendi Ede Környezetanalitikai Laboratórium gyorsító tömegspektrométerén (AMS) folyó C-14-es mérésekhez módszereket dolgoztak ki vízben oldott szerves szénre és festmény műtárgy vászon kormeghatározásához, a talajok összes szervesanyag tartalmának analizésére. Bemutató esettanulmányt végeztek a Zsolcai halmok korának becslésére.

Meghatározták a Hajnóczy-barlangi állócseppkő stabilizotóp-idősort ($\delta^{13}\text{C}$, $\delta^{18}\text{O}$), valamint egy 11-éves havi csapadék idősor tríciumkoncentrációját, megtörtént az adatok kezdeti összevetése a napciklussal. Finomították a faévgyűrűk alfacellulóza preparálásának módszerét.

A talajgáz radontartalmának mérése helyett talajminták radonkibocsátásának a mérésével új alapokra helyezték az építési területek radonveszélyességének meghatározására szolgáló eljárásukat. Ez részben megbízhatóbbá, részben költségkímélőbbé tette a módszert. Reprezentatív lakásradon-felmérés eredményeként kiemelkedően magas (a szokásosat mintegy háromszorosan meghaladó) radonszinteket találtak egy erdélyi településen.

Módszerfejlesztés és első mérési eredmények születtek a Radioaktív Hulladékokat Kezelő Közhasznú Nonprofit Kft. püspökszilágyi telephelyén a figyelőkutakban az összes oldott szén- és a szerves oldott komponens C-14 tartalmának mérésére.

Méréssorozatot végeztek a Paksi Atomerőmű primerkörü hőhordozójában, a pihentető medencékben és a C-30-as kazettaszállító konténer vizében oldott szerves szén C-14 tartalmának mérésére. Módszer- és mérőrendszer-fejlesztés történt a Paksi Atomerőmű SIPPING berendezés (a berendezéssel történő fűtőelemvizsgálat célja az üzemanyagciklusban már részt vett kazetták hermetikusságának ellenőrzése) hatásfokának meghatározásához, valamint a berendezés detektorának kalibrációjához. Az erőművel kapcsolatos további műveletek: az elérhető dúsítási tényező növelése a Se-79 radiokémiai elválasztása során a kiindulási mintamennyiség növelésével és a hozzáadott inaktív hordozó mennyiségének csökkentésével; az induktív csatolású plazma tömegspektrométeres mérés fajlagos háttérének csökkentése és a zavaró tényezők kiküszöbölésére korrekciós mérések kidolgozása; folyadékszintillációs mérési módszer adaptálása a C-14 direkt mérésére lúgos szén-dioxid csapdából nukleáris létesítmények légnemű ^{14}C kibocsátásának könnyebb meghatározásához.

Légköri aeroszolban lévő Cl és S kémiai állapotának meghatározására kísérletet végeztek Szlovéniában, a Jozef Stefan Intézetben hullámhosszdiszperzív röntgenemissziós spektroszkópia alkalmazásával. Megállapították, hogy a Cl K_{β} röntgen vonalai alkalmasak a Cl kémiai állapotának meghatározására. Megmutatták, hogy a módszer használható vékony, polikarbonát fóliára gyűjtött aeroszolminták elemzésére minden különösebb mintaelőkészítés nélkül. Kén esetében a S K_{α} vonalának eltolódásából állapították meg, hogy a kén szulfát (SO_4) formában volt jelen.

Esettanulmányok keretében jellemezték a munkahelyi aeroszol szennyezettséget. Komplex vizsgálatot végeztek egy hullámforrasztókat üzemeltető csarnokban, melynek eredményeként sikerült azonosítani és jellemezni a külső forrásból származó, valamint a gyártási folyamatok során keletkező légekori aeroszol részecskéket.

b) Tudomány és társadalom

A fizika és a mindennapok ezernyi kapcsolatából 2012 márciusában a mérnöki tudományok játszották a központi szerepet a Fizikusnapokon, az Atomki hagyományos ismeretterjesztő programjában. A diákok és más érdeklődők előadásokban ismerkedhettek meg a technika és a fizika kölcsönhatásának látványos eredményeivel. A rendezvénynek olyan programpontja is volt, amikor egy adott időpontra gyülekeztek az érdeklődők, és szervezett vezetés mellett megtekinthették az intézet néhány érdekes laboratóriumát. A program részét képező rendhagyó fizikaórákon való részvételt is tekintetbe véve a Fizikusnapokat 2012-ben is nagy érdeklődés kísérte, a résztvevők száma kb. 1000 fő volt.

A Fizikusnapok mellett évközben is lehetőség nyílt az Atomkiba tett látogatásokra. Ez többnyire azt jelentette, hogy előzetes bejelentés alapján egy diákcsoport megtekintette az intézet valamelyik laboratóriumát, és meghallgatta egy felkért kutató ismertetését.

Európában egyedülálló Atomenergetikai Múzeum nyitotta meg kapuit a paksi atomerőmű területén március 7-én. Az új múzeum anyagához számos kiállítási tárgy az Atomki is hozzájárult.

A Természet Világa májusi száma olyan cikkeket tartalmaz, amelyeket az Atomki kutatói írtak az intézeti kutatómunka legérdekesebb területeiről. A folyóirat e számának DVD-melléklete is van, amelyen az Elemi álm című ismeretterjesztő film animációval megszemélyesített mikrorészecskék szerepeltetésével ad bepillantást azok fizikájába és az Atomki néhány részlegének munkájába.

Az intézet egyik gyorsítója, az ECR-ionforrás működésének 20. évéhez érkezett. Az ebből az alkalomból rendezett találkozót tudományos és népszerűsítő előadásai a tudományos ismeretterjesztés fontos eseményét jelentették 2012 szeptemberében.

Ugyancsak szeptemberben került sor a tudománnyal való találkozás szokásosan sikeres eseményére, a Kutatók Éjszakájára. A nanorendszerekről szóló előadásra megtelt a terem, majd pedig az intézet udvarán az éjszakába nyúlóan játszottak a diákok az erre az alkalomra összegyűjtött különleges eszközökkel.

A CERN Nagy Hadronütköztetője 2012-ben főszereplője volt a világ tudományos életének, hiszen itt került sor a Higgs-bozonnal kapcsolatos fontos kísérletekre. Az Atomki is részt vett a részecskefizika nagy eseményeinek népszerűsítésében, hiszen novemberben a Magyar Tudomány Ünnepe keretében a CERN Nagy Hadronütköztetőjével kapcsolatos debreceni számítógéprendszerrel hallhattak előadásokat az érdeklődők, és az év folyamán magáról a Higgs-bozonnól is volt ismeretterjesztő előadás.

Az ismeretterjesztő cikkek és előadások mellett több más fórumon is szerepeltek az intézet kutatói: pl. interjú az OTKA honlapján, az Élet és Tudományban, az Innotékában. Ezek az alkalmak is lehetőséget adtak, hogy ismertessék eredményeiket és a tudományos élettel kapcsolatos nézeteiket. Számos hír jelent meg az intézetről a helyi és országos lapokban, internetes fórumokon.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A Debreceni Egyetem tanszékei és a Wigner Fizikai Kutatóközpont továbbra is az első helyet jelentik a hazai intézményekkel folyó együttműködésekben, de széleskörű az együttműködés más intézményekkel is.

Az intézet Paks, Püspökszilágy és Bábaapáti berendezéseinek radioaktív ellenőrzésével kapcsolatos tevékenysége továbbra is fontos szerepet tölt be az országos környezetvédelemben, az Atomki fejlesztőtevékenységében.

Jelentős szerepe van az Atomki radiokarbon-kormeghatározási szolgáltatásának különböző hazai és külföldi intézeteknek, szervezeteknek, cégeknek és magánszemélyeknek.

Sikeres lezárult az Isotoptech – MTA ATOMKI – ETH háromoldalú svájci-magyar kutatás/fejlesztési megállapodás „*Development of an EnvironMICADAS ¹⁴C AMS system for Hungary*” nevű programja.

Az intézet 2012-ben megtartotta korábban is betöltött szerepét a felsőoktatásban, erősítette a Debreceni Egyetemmel fenntartott hagyományos kapcsolatait. Emellett a Szegedi Tudományegyetemen és a Pécsi Tudományegyetemen is oktattak az Atomki kutatói. A beszámolási időszakban meghirdetett 45 kurzus keretében 860 tantervi óra megtartásával járultak hozzá az oktatáshoz. A gyakorlati órák száma 2012-ben 27 kurzus keretében 286 volt. Az oktatásban összesen 34 kutató vett részt. A pregraduális oktatás mellett fontos terület a doktori képzés. A Fizikai Doktori Iskola 20 törzstagja közül 9 az Atomki kutatója. A beszámolási időszak folyamán 19 PhD-, 11 diplomamunkás, 6 szakdolgozó és 7 TDK-hallgató dolgozott az intézetben, a témavezetésre fordított órák száma összesen 3720 volt. Az intézetben folytatódott a kutató-hallgatói ösztöndíjas program, amelynek keretében egyetemisták vállalnak részt a kutatómunkában. A tavaszi félévben 8 ilyen ösztöndíjas volt, az őszi 6. Az intézet egy hatnapos nyári szakmai gyakorlatra fogadott fizika BSc szakos hallgatókat a Debreceni Egyetemről.

Az intézet kutatói szervezőként és résztvevőként voltak jelen a Jávorkúton megrendezett XV. Magfizikus Találkozón.

A *nemzetközi kapcsolatok* természetesen ezúttal is fontosak voltak a kutatásban. Folytatódtak a korábbi együttműködések, és nemzetközi találkozókra is sor került az intézetben.

Az MTA Atommagkutató Intézet által szervezett „10th International Conference on Clustering Aspects of Nuclear Structure and Reactions” című konferencia sikeresen lezajlott 2012. szeptember 24-28 között. A találkozón 87 külföldi fizikus, és mintegy 20 hazai vett részt. Összesen több mint 80 előadás hangzott el. A rendezvény helyszíne a debreceni Kölcsey Konferenciaközpont volt. A résztvevők ellátogattak az MTA Atommagkutató Intézetbe is, ahol több órás program várta őket. A Kutatók Éjszakája 2012. évi előadója is a konferencia résztvevői közül került ki. A konferencián elhangzott előadások a Journal of Physics folyóirat Conference Series című sorozatában fog megjelenni 2013-ban. A konferencia nemzetközi tanácsadó testülete és maguk a résztvevők is nagyon sikeresnek értékelték a konferenciát.

Az aeroszolrészecskék analízisével kapcsolatos tréninget szervezett a NAÜ-vel közösen az intézet ionnyalábanalitikai csoportja. A találkozón Közel-Keletről érkezett és helyi kutatók vettek részt.

Az ECR Laboratórium volt a házigazdája egy kétnapos szakmai tanácskozásnak (ENSAR program, ARES alprogram), melyen német, francia, olasz, holland, finn és magyar kutatók az ECR-ionforrásokon folyó kutatásokról tanácskoztak.

Az ENIAC (European Nanoelectronics Initiative Advisory Council) központi idegrendszerre irányuló alprogramjában a kisállat-PET-fejlesztésben aktív és egyben a magyar konzorcium vezetőjének szerepét betöltő Atomki adott otthont szeptemberben az ENIAC CSI projekttalálkozóknak.

Külföldi kutatók is érkeztek hosszabb időszakra Debrecenbe. Nukleáris asztrofizikai kutatómunkában 8 hónapot töltött el egy bukaresti kutató két éves OTKA pályázata keretében. E témakörben PhD-munkáján Erasmus-ösztöndíjjal dolgozott egy Törökországból érkezett kutató. Az Arizonai Egyetemről Fulbright ösztöndíjas professzor vendégkutató C-14 kormeghatározás témában dolgozott 5 hónapot az Atomkiban. Az MTA meghívására egy – a nukleáris asztrofizika témakörében dolgozó – elméleti magfizikus svájci kutató négy hónapot töltött az intézetben.

A külföldi kutatók debreceni tevékenységében továbbra is fontos szerepe van a CHARISMA EU FP7 programnak. A kulturális örökség megőrzését Európa-szerte fontos feladatnak tartják. A projekt keretében, összesen 6 külföldi kutatót fogadtak Belgiumból, Lengyelországból, Németországból és Romániából.

Az Atomki Külső Tanácsadó Testülete 2012. szeptember 24–25. között tartotta ülését az intézetben.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai vonatkozásban az Atomki a legnagyobb volumenű támogatásokat az NFÜ, a Radioaktív Hulladékokat Kezelő Kft., az NKTH – OTKA és az OTKA nevű szervezetektől kapta, nemzetközi téren pedig az Európai Uniótól.

Az intézetnek 112 pályázata volt 2012-ben, ezek közül 42-nél a teljes összeg 10 millió Ft fölött volt, 25-nél pedig 20 millió Ft fölött. Az alábbiakban felsoroljuk ezt a 25 pályázatot, és megadjuk, hogy a pályázatból mekkora összeg az Atomkié, valamint hogy 2012-re ebből mennyi jutott.

Itt jegyezzük meg, hogy az intézet több nyertes TÁMOP-pályázatban konzorciumi tag. Háromban a Debreceni Egyetem, egyben a Szegedi Tudományegyetem, egyben a Miskolci Egyetem a konzorciumvezető. Ezek a projektek többségükben 2013-ban indulnak, de elnyerésük a 2012-es év sikere.

NFÜ: Komplex épületenergetikai fejlesztés, 325959 E Ft – 198335 E Ft

NFÜ: PRIZMATECH klaszter, 21845 E Ft – 2568 E Ft

NFÜ: Impulzuslézerek alkalmazása, 19144 E Ft – 4786 E Ft

NFÜ: Jövő Internet kutatások, 49988 E Ft

NFÜ: Az Atomki tudományos eredményeinek terjesztése, 99190 E Ft

NFÜ: Célzott kémiai és biológiai alapkutatások, 57600 E Ft

NFÜ: Intelligens funkcionális anyagok, 116699 E Ft

NFÜ: Kommunikációs protokoll kutatása, 43172 E Ft – 10600 E Ft

NFÜ: A jövő laboratóriuma az anyagtudományban, 105723 EUR – 25723 EUR

NKTH– OTKA: Új fizika keresése a CMS detektorral, 29344 E Ft – 3021 E Ft

NKTH– OTKA: A Napban lejátszódó $3\text{He} + 4\text{He}$ reakció, 24000 E Ft – 2762 E Ft

NKTH: Újgenerációs, környezetbarát vékonyréteg-napelemek, 32000 E Ft

OTKA: Alapvető kölcsönhatások és egzotikus magállapotok, 23157 E Ft

OTKA: A nehéz elemek nukleoszintézise, 21998 E Ft – 6941 E Ft

OTKA: Korrelációk az atommagokban, 31008 E Ft – 13152 E Ft

OTKA: Neutrondetektorok fejlesztése, 29985 E Ft – 21588 E Ft

Radioaktív Hull. K. Kft.: Püspöksz. RHT terül. vett m. vizsg., 108788 E Ft – 28096 E Ft
 EU: A jövő laboratóriuma NFÜ: Előrehaladott képalkotási rendszer, 160954 E Ft – 13102 E Ft
 EU: Mesterséges gyémánt alapú detektorok fejlesztése, 34202 EUR
 EU: E+ E- detektor fejlesztése, 59625 EUR
 EU: EURATOM Fúziós Tréning, 145350 EUR
 EU: Trícium - oktatási program, 65000 EUR
 EU: Kollektív gerjesztések atomi ionizációban, 100000 EUR
 EU: Asztrofizikai p-folyamat, 750000 EUR
 EU: CHARISMA, 197000 EUR – 102501 EUR

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk¹

1. Chatrchyan S, Khachatryan V, Sirunyan AM, Tumasyan A, Adam W, Aguilo E, et al. (2891) Horváth D, Béni N, Fenyvesi A, Molnár J, Pálinkás J, Szillási Z: Observation of a new boson at a mass of 125 GeV with the CMS experiment at the LHC. Physics Letters B, 716:(1) 30-61 (2012)
2. La Cognata M, Spitaleri C, Trippella O, Kiss GG, Rogachev GV, Mukhamedzhanov AM et al. (15): Measurement of the - 3 keV Resonance in the Reaction C-13(alpha, n)O-16 of Importance in the s-Process. Physical Review Letters, 109:(23) Paper 232701. 5 (2012)
3. Csige L, Csatlós M, Faestermann T, Gulyás J, Habs D, Hertenberger R et al. (11) Hunyadi M, Krasznahorkay A: Transmission resonance spectroscopy in the third minimum of Pa-232. Physical Review C Nuclear Physics, 85:(5) Paper 054306. 5 (2012)
4. Gottardo A, Valiente-Dobón JJ, Benzoni G, Nicolini R, Gadea A, Lunardi S et al. (84) Algora A, Dombrádi Z: New isomers in the full seniority scheme of neutron-rich lead isotopes: The role of effective three-body forces. Physical Review Letters, 109:(16) Paper 162502 (2012)
5. Gruber E, Kowarik G, Ladinig F, Waclawek JP, Schrempf D, Aumayr F et al. (12) Bereczky RJ, Tőkési K: Temperature control of ion guiding through insulating capillaries. Physical Review A, 86:(6) Paper 062901. 8 (2012)
6. Gulyás L, Igarashi A, Kirchner T: Double and transfer ionization in collisions of He with bare ions. Physical Review A, 86:(2) Paper 024701 (2012)
7. Gyürky Gy, Mohr P, Fülöp Zs, Halász Z, Kiss G G, Szücs T, Somorjai E: Relation between total cross sections from elastic scattering and α -induced reactions: The example of 64Zn. Physical Review C Nuclear Physics, 86:(4) Paper 041601. 6 (2012)
8. Juhász Z, Kovács S T S, Herczku P, Rácz R, Biri S, Rajta I et al. (10) Szilasi S Z, Pálinkás J, Sulik B: Guided transmission of 3 keV Ar7+ ions through dense polycarbonate nanocapillary arrays: Blocking effect and time dependence of the transmitted neutrals. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms, 279: 177-181 (2012)

¹ Itt a fontos tematikák bemutatására törekedtek, komoly eredményeket bemutató cikkek kisebb impaktfaktor esetén is helyet kaphatnak. Ugyanakkor a CMS kollaboráció 2012-es évi nagy impaktfaktorú közleményeiből [12 PRL, 31 J. HEP, 6 Phys. Rev. D és 23 Phys. Lett. B] ebben a listában csak egy szerepel.

9. Lévai G: Gradual spontaneous breakdown of PI symmetry in a solvable potential. Journal of Physics A-Mathematical and Theoretical, 45:(44) Paper 444020 (2012)
10. Nándori I, Rácz J: Magnetic particle hyperthermia: Power losses under circularly polarized field in anisotropic nanoparticles. Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics, 86:(6) Paper 061404. 8 (2012)
11. Papp L, Palcsu L, Major Z, Rinyu L, Tóth I: A mass spectrometric line for tritium analysis of water and noble gas measurements from different water amounts in the range of microlitres and millilitres. Isotopes in Environmental and Health Studies, 48:(4) 494-511 (2012)
12. Papp T: A critical analysis of the experimental L-shell Coster-Kronig and fluorescence yields data. X-Ray Spectrometry, 41:(3) 128-132 (2012)
13. Rotaru F, Negoita F, Grévy S, Mrazek J, Lukyanov S, Nowacki F et al. (22) Dombrádi Z, Sohler D: Unveiling the intruder deformed 2+ state in Si34. Physical Review Letters, 109:(9) Paper 092503 (2012)
14. Scott D A, Caciolli A, Di Leva A, Formicola A, Aliotta M, Anders M, et al. (32) Elekes Z, Fülöp Zs, Gyürky Gy, Somorjai E, Szücs T: First Direct Measurement of the $^{17}\text{O}(p,\gamma)^{18}\text{F}$ Reaction Cross Section at Gamow Energies for Classical Novae. Physical Review Letters, 109:(20) 202501 (2012)
15. Sohler D, Kuti I, Timár J, Joshi P, Molnár J, Paul E S et al. (30) Algora A, Dombrádi Zs, Gál J, Kalinka G, Krasznahorkay A, Zolnai L: High-spin structure of ^{104}Pd . Physical Review C Nuclear Physics, 85:(4) p. 044303. 13 (2012)
16. Szoboszlai Z, Kertész Zs, Szikszai Z, Angyal A, Furu E, Török Zs et al. (8) Kiss Á Z: Identification and chemical characterization of particulate matter from wave soldering processes at a printed circuit board manufacturing company. Journal of Hazardous Materials, 203-204: 308-316 (2012)
17. Szücs T, Bemmerer D, Cowan T, Degering D, Elekes Z, Fülöp Zs, et al. (13) Gyürky Gy: Shallow-underground accelerator sites for nuclear astrophysics: Is the background low enough? European Physical Journal A, 48:(1) Paper 8. 8 (2012)
18. Tárkányi F, Ditrói E, Hermanne A, Takács S, Ignatyuk A V: Investigation of activation cross-sections of proton induced nuclear reactions on natMo up to 40 MeV: New data and evaluation. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions With Materials and Atoms, 280: 45-73 (2012)
19. Vértesi T, Brunner N: Quantum Nonlocality Does Not Imply Entanglement Distillability. Physical Review Letters, 108:(3) Paper 030403. 4 (2012)

**AZ MTA ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI
ADATAI 2012-BEN**

Főbb mutatók 2012-ben

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	197	Ebből kutató ² :	95	
PhD, kandidátus:	62	MTA doktora:12	Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			3	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			34	

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	494		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	456		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	4		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	396		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	252		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	2
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	4

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	856,81	Összes független hivatkozás száma:	4082
Összes hivatkozás száma ⁸ :	5484		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	5	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	98		
	posztterek száma:	19	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	37	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	4		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	34		
Témavezetések száma: TDK munka:	7	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	11	PhD:	20

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	1207 092	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	10	Teljes saját bevétel:	499 906	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			14	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	70 118	E Ft	
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			14	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	26 574	E Ft	
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			66	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	205 689	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			18	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	19 607	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	245 395	E Ft		

Részletezett pénzügyi adatok 2012-ben

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	1207 092	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	499 906	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	70 118	E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	26 574	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	198 335	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	7354	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	19 607	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	25 520	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	219 875	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:		E Ft

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

székhely: 9400 Sopron, Csatkai Endre u. 6-8.; Pf. 5.
telefon: (99) 508 340; fax: (99) 508 355
főigazgató: 1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 15-17.
telefon: (1) 391 9322; fax: (1) 275 4668
e-mail: abraham.peter@csfk.mta.hu; honlap: csfk.mta.hu

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2012-ben

Általános értékelés

A Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont 2012. január 1. óta halad egy egységes, az intézetek valódi együttműködésén alapuló kutatási intézmény kialakítása felé. A lehetséges közös témák felismerésén és elindításán túl az új központnak a korábbi intézeteknél nagyobb mérete lehetővé teszi nagyobb volumenű projektek elindítását, a sikeresebb pályázást. Jelenleg nagy léptékű, a CSFK egészét igénylő projektpályázati lehetőség nem látható, az Európai Unió HORIZON 2020 és az Európai Kutatási Tanács kiemelt kutatói támogatási programjaiban való minél sikeresebb részvétel előkészítése folyik. A Központon belül az egyes intézetek korábbi izoláltsága megszűnt, teljesítményük egymás számára átláthatóvá vált, ami egyértelműen segíti a korábban kevésbé produktív irányok módosítását. Az elmúlt időszak legfontosabb feladata, és egyben legfontosabb eredménye az intézetek korábbi kutatási témapalettájának frissítése, új kutatási témák bevezetése, a meglévők dinamizálása volt. Azon felül, hogy elindították, és jelentős infrastrukturális háttérrel, valamint két fiatal kutatói állással segítették a CSFK közös laboratóriumi asztrofizika témáját, a 2012-ben elnyert két Lendület-pályázat új perspektivikus témákat hozott a Csillagászati Intézetbe (CSI), valamint a Földtani és Geokémiai Intézetbe (FGI). A soproni Geodéziai és Geofizikai Intézetben (GGI) is kidolgoztak – többek között Lendület pályázatok formájában – több új kutatási témajavaslatot, a Földrajztudományi Intézetben (FTI) pedig elindult a Magyar Nemzeti Atlasz koncepciójának kialakítása.

Új kutatási irányok megjelenése

Laboratóriumi asztrofizika. A CSFK közös, „emblematis” tudományos témája, amely bizonyítja, hogy a csillagászat és a földtudományok napjainkra valóban kapcsolódó tudományágak lettek. A témának korábban nem voltak hagyományai az akadémiai intézetekben, ezért az elinduláshoz jelentős segítséget kapott a kutatóközpont forrásaiból. A főigazgató a CSI és az FGI több kutatóját átirányította erre a területre, az MTA infrastrukturális pályázatból alapvető műszereket szereztek be, valamint két fiatal kutatói állást is ehhez a témához rendeltek. A műszereket befogadó új laboratórium kiépítése 2013 fontos feladata. A sikeres indulás garantálására – a hazai hagyományok hiánya miatt – elindult a kutatói mobilitáson alapuló ismeret- és gyakorlatszerzés. Ennek első fontos állomása volt a heidelbergi Max Planck Csillagászati Intézet igazgatója, Thomas Henning professzor részvételével a Csillagászati Intézetben megszervezett workshop, amin a csillagászat és földtudomány hazai kapcsolódási pontjainak feltárásához a Kutatóközponton kívüli, a témában érintett fiatal kutatók is bemutatkoztak. A CSFK két fiatal kutatót vett fel 2012-ben, majd a témán dolgozó kutatók látogatást tettek a grenoble-i Institute of Planetology & Astrophysics intézetben. A konzultációk eredményeképpen a grenoble-i intézetben a kutatóközpont két kutatója 2013-ra több hónapos kutatómunkára kapott támogatást. További együttműködés alakult ki a Jénai Egyetem Asztrofizikai Intézetével, a konkrét kutatási munka kidolgozása és az ott töltendő szakmai tanulmányutak előkészítése 2013 elején történik meg.

Az Akadémia által meghívott vendégprofesszorok. Az MTA meghívására 2013-ban két, nemzetközileg is magasan kiemelkedő vendégkutató érkezik a központba. Prof. Stephen Mojszis a laboratóriumi asztrofizika mellett a geofizika és planetológia összekapcsolását fogja elősegíteni, míg Prof. Željko Ivezić a 2020-as évek egy legnagyobb csillagászati vállalkozása, a Large Synoptic Survey Telescope (LSST) programjához való magyar csatlakozás előkészítésében fog részt venni.

A Lendület program hatásai. A 2012-ben nyertes két pályázattal együtt (CSI: Pál András; FGI: Kern Zoltán) már három Lendület-kutatócsoport működött a CSFK keretein belül. Év végén Kiss L. László csoportját az MTA Elnöke véglegesítette, a projekt támogatását pedig beépítette a CSFK költségvetésébe. A három projekt jelentős publikációs tevékenysége és tudományszervezési eredményei mellett legalább olyan fontos hatás a fiatal kutatók számára a perspektivikus témákban való részvétel lehetővé tétele, illetve a kiemelt támogatás eredményeként a maximálisan produktív kutatói környezet biztosítása.

Irányváltás a geodéziai kutatásokban. A geodéziai kutatásokat azonosították be azon területként, ahol beavatkozásra, infrastrukturális és tematikai megújulásra van szükség a kívánatos publikációs eredmények biztosításához. Az egyik lehetséges kitörési pont a geodinamikai földmegfigyelő rendszerek használata, kiaknázása. A műholdas radarinterferometria geodéziai alkalmazása az utóbbi években rohamos fejlődésnek indult. Az új tudományos program célja a műholdas radarinterferometria geodinamikai alkalmazásának kutatása, a Pannon-medencében lejátszódó recens tektonikai és felszínmozgási folyamatok jobb megismerése, amelyek alapján a földtani veszélyforrások kimutatására is lehetőség adódik. A radarinterferometria integrációja a lokális feszültségtér és GPS megfigyelések adatrendszerébe a geodinamikai kis elmozdulások pontos megfigyelését teszi lehetővé. A kutatások elősegítésére jelentős infrastrukturális beruházásokra került sor.

A Magyarország Nemzeti Atlasza projekt. Az Akadémia egyetértésével, a CSFK Földrajztudományi Intézetében terv készült a Magyarország Nemzeti Atlasza előkészítésére és kiadására. A tervszerint az atlasz 2013 és 2018 között készül el, már nem csak a hagyományos, hanem digitális változatban is. Ez egy MTA szintű vállalkozás, amelyben legalább hat kutatóközpont kutatói fognak részt venni.

Konferenciaszervezés. Jóllehet a szervezés már korábban elindult, az Európai Űrügynökség Workshop on Mars - Connecting Planetary Scientists in Europe (MPSE) c. konferenciájának lebonyolításában már a CSFK földtudományi intézetei is részt vettek. Ennek is tulajdonítható, hogy a hazai részvétel igen nagy mértékű volt, az MTA Könyvtár előadóterme is szükségesnek bizonyult a nagy érdeklődés és a hazai földtudományi kutatók és hallgatók nagy számú részvételének köszönhetően.

Tudományszervezési eredmények

Kutatócsoportok. A tematikai megújulás rendkívül lényeges eleme, hogy nagyobb részt nem felülről diktált, hanem alulról építkező módon történik, a kollégákban meglévő kreativitás, elképzelések felhasználásával. A 2012-es év során az átalakítás vezérlő elve a vízióval rendelkező, maga köré embereket gyűjteni képes dinamikus PI-ok beazonosítása és az intézeti kutatómunka szervezésébe való bevonása volt. A kutatóközpont elődintézményei közül a Csillagászati Kutatóintézet már közel két évtizede átállt az osztályszerkezetről a kutatócsoportos rendszerre, amelyet PI-ok vezetnek. A beszámolási időszakban megtörtént a CSFK másik három intézetében is az osztályokról a kutatócsoportokra való teljes átállás, aminek tetten érhető következményei mindenütt kimutathatók. Ilyenek például az intézetközi kutatások beindulása, mint pl. a laboratóriumi asztrofizika a CSI és az FGI

együttműködésében, vagy a geofizikai és napfizikai kutatások kombinálása a GGI és a CSI napfizikusai között.

A teljesítménykövetelmény-rendszer. A CSFK teljesítménykövetelmény-rendszerének koncepciója két pilléren nyugszik: az egyéni és kutatócsoport-szintű beszámoltatáson és az arra érdemes kutató-csoportok támogatásán. A beszámolási időszakban megtörtént a négy előd intézmény korábbi gyakorlatának felmérése, valamint egy új, közös értékelési rendszer alapjainak letétele.

Az FTI pénzügyi konszolidációja. A kutatóközpontba az FTI jelentős hiánnyal lépett be. Ennek kezelésére a főigazgató szigorú intézkedéscsomagot vezetett be, melynek főbb elemei a nyugdíjkorhatár elért négy kolléga (köztük két MTA doktora) nyugdíjazása, a más egyetemeken is oktató vezető kutatók szerződésének módosítása közös megegyezéssel, határozott idejű félállásra, valamint szigorú dologi takarékosági intézkedések. Az intézkedések hatására 2013-ra sikerült kiiktatni a pénzügyi hiányt generáló körülményeket.

Kutatóközponti tudományos titkár kinevezése. A pályázati információ célzottabb eljuttatására az érintettekhez, illetve a pályázatok és díjak figyelésére megtörtént egy CSFK szintű tudományos titkár kinevezése.

Potenciális Lendület, ERC, H2020 pályázók meghívása. A főigazgató, az intézetigazgatók, valamint a tudományos titkár a beszámolási időszakban rendszeresen konzultált a CSFK-n kívül - adott esetben külföldön - dolgozó kutatókkal a kutatóközpont személyi állományának, illetve tudományos palettájának erősítése céljából.

Műszaki fejlesztés. A CSFK hosszú távú stratégiájának kiemelt célja olyan intézménnyé válni, amely sikeresen be tud kapcsolódni nemzetközi műszerépítő projektekbe, és nyitni az innováció és a mérnökképzés felé. A nagy európai műszerépítő központokkal (beleértve az ESA űrközpontjait is) való együttműködés leghatékonyabb módja, ha lehetővé válik magyar mérnökök hosszabb-rövidebb időre való kiküldésére, ami elősegíti az ottani projektekbe való beépülést, majd konkrét feladatok, megrendelések hazahozatalát. Egy élő együttműködés keretében OTKA forrásból már kiküldtek a hollandiai Astron laboratóriumba egy fiatal gépészmérnököt, aki onnan optikai automatizálási feladatokat hozott magával. Több hasonló projekttel kapcsolatosan is tárgyalásokat folytattak, ezek közül a svájci vezetésű CHEOPS exobolygó-kutató űrtávcső konzorciumához való csatlakozás 2012 decemberében lehetővé teszi magyar úripari cégek bevonását tudományos-technikai K+F tevékenységbe a CSFK vezetésével.

Pályázati aktivitás. A kutatóközpont kutatói az év során több olyan TÁMOP- és OTKA-pályázatot nyújtottak be, amelyek már tükrözik az intézetek összefogását, a tudományos munka átjárhatóságát.

II. Közvetlenül a kutatóközpont vezetése alá tartozó kutatócsoportok kutatási eredményei, ezek jelentősebb publikációi

Az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpontban jelenleg nincsenek közvetlenül a kutatóközpont vezetése alá tartozó kutatócsoportok, így a tudományos eredmények és a jelentősebb publikációk az alkotó intézetek éves beszámolóiban találhatóak meg. A megindult intézetközi interdiszciplináris kutatások középtávon kijelölik a közvetlenül a kutatóközpont vezetése alá tartozó tudományos irányokat.

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FÖLDRAJZTUDOMÁNYI INTÉZET

1112 Budapest, Budaörsi út 45; 1554 Budapest, Pf. 130.
telefon: (1) 309 2628; fax: (1) 309 2628
e-mail: kocsis.karoly@csfk.mta.hu; honlap: www.mtafki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az intézet az akadémiai intézményhálózat átszervezését követően 2012-ben a Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont egyik intézeteként végezte tudományos tevékenységét. Az év során az átszervezéssel kapcsolatos teendők, az új szerkezet és működési mechanizmus kialakítása jelentős energiákat kötött le, mely a kutatási tevékenység hatékonyságát fékezte.

A kutatóhely hosszú távú, kiemelt alapkutatási 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 kutatási projektekhez (TRANSMIG – SNF; HEAS – IVF; EASTMIG – IVF), a hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez (OTKA, TÁMOP).

Az év kiemelkedő tudományos eredménye a hon- és nemzetismeret terén mérőföldkönek számító publikáció megjelentetése, melynek címe „*A Kárpát-Pannon-térség változó etnikai arculata*”. Az OTKA támogatásával, az MTA CSFK Földrajztudományi Intézetében (egy közel negyed évszázadnyi előzetes kutatás eredményeként), a Honvédelmi Minisztérium Térképészeti K.N.Kft. által 2012 legvégén kinyomtatott atlasz a Kárpát-medence és szomszédsága, tehát a közel félmillió km² kiterjedésű, 60 millió lakosnak otthont adó, 12 országot érintő Kárpát–Pannon-térség népessége etnikai arculatának fél évezredes változását mutatja be települési részletességgel. az etnikai atlasz (leginkább annak 125 x 175 cm-es falitérkép része) alkalmas tudományos ismeretterjesztésre, köz- és felsőoktatási, (hazai és EU-s) kormányzati munkában történő széles körű használatra.

Az FTI – más hazai földtudományi kutatóhelyekkel karöltve – évtizedek óta foglalkozik a hazai árvizek, felszínmozgásos folyamatok (földcsuszamlások, bánya- és folyópartomlások, talajpusztulás) geomorfológiai és hidrogeográfiai, okainak feltárásaival, valamint az ember építette műtárgyak esetében bekövetkező katasztrófák természetföldrajzi és antropogén eredetének vizsgálatával.

Korunk társadalmának aktuális problémáit, kihívásait érintő társadalomföldrajzi kutatások a nemzetközi migráció, a hagyományos és kreatív gazdaság, turizmus és városföldrajz témáinak jobb megértéséhez járultak hozzá új tudományos eredményekkel.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Természetföldrajzi kutatások

„*Az árkos erózió szerepe Magyarország jelenkori felszínfejlődésében*” című OTKA-szerződés keretében elkészült az ország vízmosás sűrűség térképe, amely teljesen új tudományos termék és eredmény. A térkép egy GIS adatbázis része, amelyhez elkészült a földhasználati, talaj- és lejtéstérképek digitális változata is. Az országos vízmosás-kataszterben közel 112.000 vízmosás szerepel, melyeknek összes hossza meghaladja a 22.000 km-t, ebből statisztikákat készítettek országos szintre, nagytájakra bontva, valamint kisebb mintaterületeket kiválasztva. A vízmosások kialakulását elsősorban a domborzat és a talajképző közet befolyásolja, a talaj

szerepe kevésbé fontos. Talajérték szempontjából megállapítható, hogy a vízmosások a közepes minőségű talajokon jellemzőek, a legalacsonyabb talajértékszámú területeken pedig nem, mivel ezek túlnyomó részt a homokterületek, ahol annyira elnyelik a talajfelszínre érkező vizet, hogy felszíni vízfolyások sem alakulhatnak ki rajtuk. Összehasonlították a vízmosásokra jellemző területhasználatot a topográfiai térkép készítésének idején (1960-as évek vége, valamint 2000). Megállapítható, hogy az erdőkben található vízmosások aránya csökkent az erdőirtások következtében. Az Észak-Magyarországi középhegységben csökkent a művelt területeken található vízmosások aránya, mivel a legkedvezőtlenebb adottságú területeken felhagytak a mezőgazdasági műveléssel. A szántókon található vízmosások aránya a leginkább szántóként hasznosított Dunántúli-dombságban a legkisebb.

„Nagy szervesanyag-tartalmú anyagok optimális minta-előkészítési eljárásának kidolgozása lézeres szemcsevizsgálati mérésekhez” című kutatás a különböző vizsgálati módszerek összehasonlításával folytatódott. A vizsgálatok megmutatták a talajminták szemcseméret elemzése előkészítésének, az ásványi szemcsék dezaggregálásának fontosságát, valamint azt, hogy a dezaggregálás elégtelensége jelentősen kisebb agyagtartalmat eredményez. Talajok szemcseméret meghatározásában, de különösen a jelentősebb szervesanyag-tartalmú talajokéban a hidrogén-peroxidos előkészítő eljárás használandó. A Na-pirofoszfátnak és az ultrahangos kezelésnek a talajminta diszpergálásában van nagy jelentősége. Szükségesnek tartják ezért a hazai talaj szemcseméret-elemzés szabványát (szabványait) felülvizsgálni, továbbá az európai szemcseméret-elemzési eljárások tapasztalatainak megismerését és beépítését a hazai szemcseméret analitikai gyakorlatba.

„Táji mintázatok hatása vizes élőhelyek vas háztartására” (OTKA K100180) című kutatás során két témára koncentrálni végeztek kutatásokat. Az ökológiai indikátorok és környezeti tényezők kapcsolatának vizsgálata során különféle jelzőszámokat értékelték. Megállapították, hogy a vegetáció hő- (T) és vízigényét (W), valamint a talaj nitrogéntartalmát (N) és a talajreakciót (R) jelző ökológiai indikátor közül a T-érték nem alkalmas mikroklimatikus különbségek jelzésére. A másik résztema a kvantitatív szervesanyag mérő módszerek összehasonlító vizsgálata volt. Ez amiatt is fontos, mert az Európai Unió tervezett Talaj Keretirányelve tartalmazza a talajok szervesanyag tartalma megőrzésének szükségességét is. Ennek része a talaj szervesanyag (SOM) tartalmának monitorozó vizsgálata. Ez azonban adekvát kvantitatív szervesanyag vizsgáló módszer, módszerek alkalmazását teszi szükségessé. A korábban alkalmazott krómsavas módszerek környezet-egészségügyi okokból történő visszaszorulása a különböző egyéb elérhető módszerekkel való párhuzamosítását teszi szükségessé. A négy vizsgált kvantitatív szervesanyag-mérő (Tyurin-féle eljárás, di Gleria-féle kolorimetriás módszer; Izzítási veszteség; NDIR analízis) hatásosságának eredményei az összehasonlítások során erősen szórtak. Ez arra utal, hogy a mérési módszert a talaj ásványi és szerves fázisának függvényében kell megválasztani. A szervesanyag-tartalom és agyagtartalom közötti kapcsolat meghatározására a mintaszám emelése szükséges, közöttük egyelőre nem találtak összefüggést.

„Az erózió hatása a talajok szervesszén tartalmára és összetételére” című OTKA (PD100929) projekt keretében mesterséges esőztetési kísérletekkel és nagyparcellás talajeróziós monitoringgal vizsgálták az erodált anyag összetételének változását. A talaj kolloid frakciója a vizsgált talajtípusokon együtt mozog és jellemzően a hordalékban is meghatározó szerepet játszik. Az ásványi és az organikus kolloidok tehát nagyon hasonlóan viselkednek a csapadék pusztító hatására. A kis léptékű vizsgálatok során a kis távolságra szállított talaj szerepét vizsgálták a tömörödés és a kérgesedés folyamatában. Megállapították, hogy az erózió hatására kialakuló talajkéreg a mikrodomborzat hatását tükrözi. A helyi magaslatokon pusztuló kéreg keletkezik, melyre a tömörödés mellett nem jellemző a szerves szén és az ásványi kolloidok feldúsulása. A lefolyástalan depressziókban azonban a hordalék frakcionálódik. Az ország három (Gödöllő, Gerézdpuszt, Ceglédbercel) erdőtalajának

vizsgálatakor jelentős – esetenként több méteres – áthalmozásokat tártak fel. A talajminták laboratóriumi elemzése folyamatban van.

„*A légköri por szerepe a paleoklimában és az üledékképződésben*” című kutatás a magyar természeti földrajz 1972 óta nemzetközi szintű eredményeket produkáló hagyományos tudományos témaköre. A nagy területeket fedő hullóporos eredetű üledékek nagyszerűen archiválták a természeti környezetben végbement változásokat több millió évre visszamenően is, és globális, regionális, valamint lokális léptékű hatótényezők elkülönítését tették lehetővé.

A plio-pleisztocén hullóporos eredetű üledékek szemcseeloszlás-elemzésére új eljárást dolgoztak ki, melynek révén a különböző szedimentációs mechanizmusok révén leülepedett populációk matematikai-statisztikai módszerekkel elkülöníthetővé, valamint a hullóporos eredetre utaló bélyegek könnyebben felismerhetővé válnak. A fiatal, pontosabb koradatokkal rendelkező üledékek esetében az új módszerrel lehetőség nyílik olyan korábban ősföldrajzi rekonstrukciókban nem alkalmazott proxyk meghatározására, mint a légköri porkoncentráció vagy a látótávolság.

„*Jelenkori porviharos események elemzése*” című kutatásban a napi adatsorokból felépített adatbázis elemzéséhez olyan algoritmust fejlesztettek, melynek révén a legjelentősebb forrásterületek jellemző mérőszámai könnyen meghatározhatóvá válnak. A hozzájuk rendelt meteorológiai adatok, szinoptikus térképek, trajektória számítások alapján tetszőleges régiók porkibocsátásnak változásait tudják elemezni 1979-től napjainkig. Vizsgálatokat eddig a Szahara kapcsán a Földközi-tenger és a Kárpát-medence térségében végeztek. Ennek során a jellemző meteorológiai hátteret és a jellemző forrásterületeket is sikerült azonosítani.

„*A dunai magaspártok földcsuszamlásainak kialakulása és felszínfejlődésük folyamata az eltérítő erő (Coriolis-erő) hatására*” című kutatás eredményei alátámasztják a Duna vándorlásával kapcsolatos tektonikai hipotéziseket, mind a töréseket – többnyire a törést követő „fellazult övvel”, árkokkal –, mind pedig a süllyedéseket (távoli szívóhatás hangsúlyozása) illetően. A Duna eredeti medréről (Budapesttől DK-re tartó) mai völgyébe (É-D-i irány Budapesten át) történő irányváltoztatásának, és a völgyben történő további nyugatra való vándorlásának fő oka a Coriolis-erő. Hatásának erőssége a helyi domborzati viszonyok függvénye. A jobbra vándorlás fő bizonyítéka a rendszeres dunai partomlás. A téma aktualitását hangsúlyozza, hogy a magaspárt domborzati adottságai hatással vannak a közlekedési (vonalas létesítmények és hajózási) útvonalak, létesítmények, a települések fejlesztési lehetőségeire. Alapvetően meghatározzák a települések terjeszkedési-beépítési lehetőségeit (Ercsi, Százhalombatta, Dunaföldvár, Bölske, Paks-Dunakömlőd stb.), a főbb közlekedési utak irányát, távolabbi régiókhoz való kapcsolatát. A geomorfológiai veszélyforrások közül a tömegmozgásos folyamatokon kívül vizsgálat tárgyát képezte még a parterózió, a víz és a szél általi talajpusztulás, a kőzetek fagykárosodása, illetve fagykárosodásból eredő balesetek és károk tanulmányozása és felmérése is.

Az intézet munkatársai *stratégiai jellegű geomorfológiai kutatásaiban* vizsgált témák egy részében az antropomorf felszín-és tájalakító tényezőket, építményeket, beruházásokat vizsgálja, azok állapotáról, esetleges rizikótényezőiről tájékoztat és a lehetséges kockázati tényezőket mérséklő megoldási javaslatokat készít és juttat el megfelelő szervekhez. Ezen kutatások a következő témákban zajlottak: *Domborzati adottságok vizsgálata a Pannonhalmi-dombság és a Gerecse nyugati pereme által határolt kistáji mintaterületen a nap- és szél-erőművek elhelyezése céljából; a Paksi Atomerőmű környezeti monitoring vizsgálata; kísérleti kutatások a felszíni és felszín alatti domborzatnak a földrengésekhez, ill. a felszín alatti vizeknek a klorid tartalomhoz való viszonyának megállapítására.*

Társadalomföldrajzi kutatások

A 2012-es év kiemelkedő tudományos eredménye volt „*A Kárpát-Pannon térség országainak etnikai földrajza és térképezése*” című OTKA-projekt eredményeként megszületett „*A Kárpát-Pannon térség változó etnikai arculata*” c. térképgyűjtemény. Az atlasz a Kárpát-medence és szomszédsága, tehát a közel félmillió km² kiterjedésű, 60 millió lakosnak otthont adó, 12 országot érintő Kárpát–Pannon-térség népessége etnikai arculatának fél évezredes változását mutatja be települési részletességgel. A több mint 34 ezer városra, községre, 9 történelmi időpontra (1495, 1784, 1880, 1910, 1930, 1941, 1960, 1990, 2001), továbbá településenként és időpontoként kb. 12-14 etnikumra vonatkozó hatalmas adatbázis tette lehetővé a fentiekben említett etnikai atlasz összeállítását, mely három szerkezeti egységből áll. Összességében megállapítható, hogy az etnikai atlasz (leginkább annak 125 x 175 cm-es falitérkép része) alkalmas tudományos ismeretterjesztésre, köz- és felsőoktatási, (hazai és EU-s) kormányzati munkában történő széles körű használatra. Szaktudományi szempontból ugyanakkor a projekt a geográfiát és kartográfiát (nemcsak hazai, hanem nemzetközi szempontból is) jelentős mértékben gazdagította, hiszen első ízben látható egyben a (12 európai országot érintő) Kárpát-Pannon-térség (tehát nem csak a történelmi magyar államterület, a Kárpát-medence) változó etnikai térszerkezetét ilyen méretarányban, részletességgel, települési (!) szinten (ráadásul angol és magyar nyelvű elemzésekkel kiegészítve).

A „*Magyarország láthatatlan turizmusa*” című OTKA kutatási projekt (K100953) első fázisa elsősorban a vizsgálat eleméleti hátterének megteremtése és a fogalmi keretek kidolgozása terén hozott új eredményeket. Bizonyosságot nyert az a hipotézis, hogy a „rejtett turizmus”, különösen annak „leplezett” válfaja elsősorban kelet-európai jelenség, az illegális, az informális és az álcázott turisztikai aktivitások a szocializmus összeomlását megelőző és a rendszerváltozást követő évek úgynevezett átmeneti társadalmaiban érhetőek tetten. Tekintettel a turizmus gazdasági funkciójára, rendkívüli szerepe van a rejtett turizmus miatt kieső bevételeknek, így a projekt kutatási eredményeinek potenciális gazdaságélénkítő relevanciája megkérdőjelezhetetlen. Az eredmények rávilágítanak arra, hogy mely területeken kell az államnak körültekintőbben ellenőrizni a turisztikai folyamatokat. A Központi Statisztikai Hivatal is felismerte a belföldi egynapos utazásokkal kapcsolatos adatgyűjtés megkerülhetetlenségét, így a velük való szoros együttműködés segítheti a rejtett turizmushoz kötődő jövedelmek „kifehérítését”.

„*Az ipari beruházások és közlekedési kapcsolataik térszerkezeti összefüggései/Spatial structural impacts of industrial investments and their transport connections*” OTKA kutatás igen fontos ismereteket nyújt az ország egészére vonatkozóan az ipari parkok fejlődése, települése és a közlekedési kapcsolatok közötti összefüggésről. Számottevő mértékben segítheti, egyrészt a gazdasági szereplők telephelyválasztását, másrészt a gazdasági vezetés számára támpontul szolgálhat az erőforrások racionális hasznosításához, a tervezéshez, a befektetések orientációjához, a regionális egyenlőtlenségek mérsékléséhez. Ráirányíthatja a figyelmet az ipari parkok helyzetére és a közlekedési infrastruktúra fejlesztésének fontosságára.

A 2010 óta zajló, Swiss National Science Foundation által támogatott *TRANSMIG (Integrating (trans)national migrants in transition states)* című projekt a délszláv háborúk után megindult migrációs folyamatokat vizsgálja kvalitatív társadalomtudományi módszerekkel. Az MTA FKI az MTA RKK kutatócsoportjával együttműködésben végzett terepi munka eddigi egyik eredményeként bizonyossá vált, hogy az 1990-es évek óta Magyarországra érkező vajdasági közép-és felsőoktatásba bekapcsolódó diákok számára a

határon átívelő oktatási célú migráció sok esetben az első lépcsőfokot jelenti a Magyarországra való áttelepedésről való döntésben.

2012-ben indult A „*Migration between Eastern Partners (Belarus, Georgia, Ukraine, Moldova) and the Visegrad Countries*” (EASTMIG) című sikeres pályázat a Nemzetközi Visegrádi Alap „Visegrad Flagship Project” keretében. Az MTA CSFK FTI a nemzetközi kutatási konzorcium vezetője, rajta kívül 3 visegrádi és 4 keleti partner vesz részt a projektben. Konzorciumi partner a prágai Károly Egyetem, a Varsói Egyetem, a Comenius Egyetem, a Belarusz Állami Egyetem, az Ukrán Nemzeti Tudományos Akadémia Földrajzi Intézete, továbbá a Transznisztriai Állami Egyetem (Tiraszpol) és a Tbiliszi Állami Egyetem. A projekt fő célja a V4-ek és a Keleti Partnerek között zajló általános migrációs folyamatok feltárása, összefoglalása, és ezen eredmények könyv formájában 2014 tavaszáig való publikálása.

A Nemzetközi Visegrádi Alap (IVF) támogatásával valósult meg a HEAS „*Residential Environment in V4 countries and Armenia*” című projekt. A projekt elsődleges célja egy fiatal kutatókból álló városföldrajzi kutatást végző hálózat kialakítása. A projekt keretében egy, az összes fővárosi lakótelep épületszintű adatbázisát és az ehhez tartozó digitális térképeket készítettek el. Ezek lehetővé tették, hogy a lakótelepek megújulásának területi sajátosságait elemezzék. A témában készült korábbi kutatások elsősorban építészeti és épület-fenntartási megközelítésből születtek, lakótelepi, vagy városi szintű összehasonlító tanulmányok Budapestre eddig nem születtek.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet munkacsoportjainak kutatómunkái több – a társadalmat is foglalkoztató – kérdést érintettek, amelyekkel kapcsolatban a tudományos közösségen kívül az ország szélesebb nyilvánosságát is tájékoztatták a helyi és országos média segítségével az intézet munkatársai. A következőkben csupán a legnagyobb sajtóérdeklődést kiváltó projektek, kiadványok, rendezvények társadalmi kommunikációja kerül említésre.

A *Katasztrófák tanulságai, stratégiai jellegű természetföldrajzi kutatások* című könyv 2011 decemberében jelent meg, ezért az a kötettel kapcsolatos sajtóesemények jórészt 2012-ben zajlottak. A könyvet az MTA elnöke és a BM Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóságának vezetője mutatta be 2012 februárjában a sajtónyilvánosság előtt az MTA székházában. A könyv aktuális, társadalmilag kiemelt témákat tárgyal. A katasztrófa-földrajzi kutatások eredményeinek bemutatásával egyrészt a hazai földtani veszélyforrásokra hívja fel a figyelmet, másrészt a súlyos anyagi károkat okozó természeti folyamatok és események kiváltó okainak feltárásával a földtudományi (azon belül geomorfológiai) kutatások stratégiai szerepére mutat rá a katasztrófák megelőzésében és a keletkező károk mérséklésében. A könyv jelentős társadalmi érdeklődést váltott ki mind hazánkban, mind pedig – érintettség lévén – a szomszédos országokban.

Hagyományos sajtó

Az MTA CSFK FTI munkatársai 2012-ben is szerepeltek országos, regionális és helyi TV-k és rádióadók műsorában. Így például az MR6 regionális rádióban a magyar diplomások elvándorlásának folyamatáról és a visszavándorlás esélyeiről; a Szegedi Városi Televízió élő stúdióbeszélgetésén, amelynek témája a földrajztudomány aktuális kutatási kérdései voltak a VI. Magyar Földrajzi Konferencia megrendezése kapcsán. Decemberben a nemzetközi migráció témakörében illetve a volt poszt-szovjet országok aktuális helyzetével foglalkozó kutatások kapcsán több kutatójukkal készült rádióinterjú.

Elektronikus sajtó

A legolvasottabb hazai hírportál, az index.hu Tudomány és technika rovatában 3 (2012. március 9; 2012. március 21; 2012. június 20.) interjú is készült az intézet kutatójával a sivatagi területekről kiinduló porviharokkal kapcsolatos kérdéskörökben.

Az intézet egyik kutatója saját weboldalt hozott létre varosrehabilitacio.net címen, amely bemutatja a legfontosabb nemzetközi és hazai kutatásai eredményeit, illetve az összes lényeges publikációja hozzáférhető. Jelenleg a Google kereső az 1. helyen, azaz a leglátogatottabb magyar weboldalként adja ki „városrehabilitáció” témakörben.

Tudásátadás

A tudományos eredmények disszeminációja döntéshozók, tudományos szféra, köz- és felsőoktatás és érdeklődők felé mindig kiemelt feladat. Az intézet munkatársai 2012-ben is igyekeztek a tudományos eredményeket közérthető módon terjeszteni.

Az intézet (tudományos profiljából eredően) hagyományosan nagy szerepet játszik a kormányzati munka kutatási eredményekkel történő támogatásában. E tekintetben 2012-ben kiemelkedő volt a kormány külügyi vonatkozású tevékenységének, a Parlament Nemzeti Összetartozás Bizottságának támogatása, amely az intézeti igazgató országgyűlési előadásában csúcspontot ért el: 2012.09.11. Budapest, Parlament, Nemzeti Összetartozás Bizottsága, Kocsis Károly: A területi autonómiák földrajzi-történeti háttere a Kárpát-medencében.

Kiemelésre méltó még az intézet két kollégájának szakértői és tanácsadói tevékenysége a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA, Bécs) és annak révén az Iráni Atomenergia Hivatal, Radioaktív Hulladékokat Kezelő Társaság (INWM) számára.

A társadalomföldrajzi kutatások köréből kiemelendő a Design Terminál, a We Love Budapest és az Urbanissimus Társaság szervezésében megrendezett „Powered by Budapest” konferencia (2012. május 25-én), ahol az intézet két kutatója „Gyorsjelentés a kreatív gazdaság európai és magyarországi helyzetéről – Egy kis elmélet gyakorlattal fűszerezve” címen tartott nagyszerű előadást. A „Szántásos és talajkímélő művelések talajeróziós vizsgálata” c. munka keretében az intézet szentgyörgyvári kísérleti telepén ez évben három bemutatót tartottak a társadalom különböző csoportjai számára, köztük kormányhivatalok, döntéshozók részvételével (40 fő, 2012.04.02.) és a Tudományos élet képviselőinek a Georgikon napok rendezvényei keretében (20 fő, 2012.10.12.).

A fiatalabb korosztályok földrajz iránti érdeklődésének felkeltése hivatás és kötelesség is egyben. Az intézet kutatói egyrészt a felsőoktatásban látnak el oktatói feladatokat. Ennek során különösen az ELTE TTK FFI-ben valósult meg a doktoranduszok és hallgatók kutatómunkába (laborvizsgálatok, terepi munka) bevonása.

Másrészt az MTA CSFK FTI munkatársai terepgyakorlatok, kirándulások szervezésével is hozzájárultak az ismeretterjesztéshez. Így megemlíthető a Monori József Attila Gimnázium 11. és 12. évfolyamos diákjai számára vezetett terepgyakorlat terepi mérések témakörben vagy természetismereti kirándulás szervezése a Ceglédberceli Általános Művelődési Központ, Óvoda Tagintézménye számára.

Kutatóik rendszeres résztvevői és szervezői is egyben az idén 140 éves Magyar Földrajzi Társaság különböző szakosztályai által szervezett tudományos-ismeretterjesztő előadásoknak. Ezek célcsoportját elsősorban a hazai földrajz-földtudományi képzésben résztvevő egyetemisták és középiskolai földrajztanárok képezik. 2012-ben 5 ilyen előadást tartottak az intézet kutatói, továbbá szervezői voltak az MFT-vel és az ELTE TTK Földrajztudományi Központjával a „Száz éves az MFT Gazdaság- (és Társadalom-) Földrajzi Szakosztálya” című konferenciának.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Az intézet a jövőben tovább kívánja fokozni intézményi kapcsolatait, mind nemzetközi, mind hazai kutatóhelyekkel és partnerekkel. A nemzetközi kapcsolatok bővítését és meglévők felhasználását jelezte, hogy az intézet konzorciumi tagként részt vett több EU FP7-es projekt előkészítésében (NEIGHBOUR, CREATIVE, AgriSCAPE, SAPROPEL), sajnos ezek nem kaptak támogatást.

Az intézet széleskörű nemzetközi kapcsolatai egy része oktatási-kutatási kapcsolat, de ugyanígy nagy jelentőségűek a különféle társasági, szerkesztőbizottsági tagságok is. Kutatóik közül nyolcan vesznek részt hosszabb ideje bizottsági tagként nemzetközi tudományos szervezetek munkájában, 1 fő nemzetközi bizottság vezetője, 6 fő nemzetközi földrajzi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja. Az MTA CSFK FTI munkatársai összesen 27 hazai tudományos bizottságban töltenek be tagságot, ebből ketten vezetői az adott bizottságnak. Az intézet kutatóinak 9 tanulmánya jelent meg külföldi szakfolyóiratokban, ebből 5 impakt faktoros folyóiratban, ezek összesített impakt értéke 5,391 volt.

A külföldi tudományos rendezvények közül az intézet kutatói a következőkön szerepeltek előadással, poszterekkel, korreferátumokkal, illetve konzulensként: Association of American Geographers, Annual Meeting, New York; IGU, Köln, RSA Regional Conference, Delft; Risk Analysis VIII – Eight International Conference on Simulation in Risk Analysis and Hazard Mitigation, Brač; FAO Agricultural Policy Forum, Ohrid)

2011-ben az intézet nemzetközi kapcsolatai különösen szorosak voltak a Román, az Ukrán, a Szerb, Belarusz valamint a Szlovák Tudományos Akadémiák földrajzi intézeteivel, a kijevi Sevcsenkó Egyetemmel, a hannoveri Akademie für Raumordnung und Landesplanunggal, a lipcsei Leibniz Institut für Landeskunde-val továbbá az ungvári, a nagyváradi, a zágrábi, az újvidéki, a lipcsei, a kolozsvári, a berni, és a berlini, krakkói, brno-i egyetemekkel, valamint a beregszászi főiskolával.

E kapcsolatok számos vonatkozásban kötődnek az említett nemzetközi együttműködésben folyó kutatásokhoz, illetve különféle kétoldalú tudományos együttműködésekhez. 2012-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 összesen négy junior és egy senior kutató érkezett az intézetbe hosszabb-rövidebb kutatómunkát végezni Belarusból, Ukrajnából és Oroszországból; az intézet egy fiatal kutatója pedig Örményországban tartózkodott ugyanezen ösztöndíjprogram támogatásával. Az intézet és a Belarusz Tudományos Akadémia Környezeti Menedzsment intézete közötti akadémiai cserekeretet felhasználva 2012-ben befejeződött a két intézmény közös kutatása és véglegesítették a 2013 elején megjelenő tanulmánykötetet, melynek címe: *Geography of Capital Cities: Minsk and Budapest*. A kötet nyomtatási költségeinek fedezésére a Budapesti Corvinus Egyetem Gazdaságföldrajzi Tanszéke jóvoltából sikerült forrást szerezni.

Az intézet kutatói közül 12 fő lát el oktatói feladatokat hazai felsőoktatási intézményekben (ME, PTE TTK, SZTE, BGF, ELTE, Kodolányi János Főiskola, Nyugat-Magyarországi Egyetem, EKTF), közülük heten doktori iskolában is oktatnak, egy fő pedig doktori iskolát vezet.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

„Gyepes sávok szerepe a talajerózióban” címmel PD OTKA (104899) pályázatot nyert az intézet egyik kutatója 2013–2015 időtartamra, (elnyert támogatás 11.962.000,- Ft). A kutatás

célja a gyepes sávok talajpusztulás, tápanyag- és növény védőszer lemosódás megelőzésében betöltött szerepének vizsgálata. Vizsgálatokat három léptékben, parcella, tábla és mikro vízgyűjtő szinten kerül elvégzésre.

„Magyarország láthatatlan turizmusa: a nem konvencionális turisztikai mobilitás társadalmi, gazdasági és környezeti vonatkozásainak vizsgálata” című kutatást az OTKA támogatta (elnyert támogatás 8.032.000 Ft). A projekt célja a „rejtett” (termékbemutatókkal összekapcsolt, osztálykirándulás, átmenő forgalom stb.) turizmus felmérése és értékelése, ajánlások, irányelvek kidolgozása.

„A poszt-szocialista urbanizáció területi jellemzői Magyarországon” (OTKA K 105534, elnyert támogatás: 14.793.000 Ft). A kutatás fő célja a magyarországi urbanizáció területi folyamatainak és a városok belső térszerkezeti átalakulásának átfogó vizsgálata 1990 óta eltelt időszakban. A kutatás célkitűzéseit két, országos (makro), ill. helyi (mikro) szintű vizsgálatokkal kívánják magvalósítani. Az országos szintű vizsgálat a népesség és a munkahelyek térbeli koncentrációja, ill. dekoncentrációja alapján az urbanizáció globális ciklusainak hazai tér- és időbeli lefolyását igyekszik felderíteni. A kutatás célja emellett a hazai városhierarchiában az elmúlt két évtizedben bekövetkezett változások feltárása. A helyi szintű vizsgálatokat különböző méretű hazai városok kiválasztott lakónegyedeiben végezték. A kutatás megújult és hanyatló városrészek társadalmi-gazdasági átalakulására, a folyamat hatótényezőire koncentrált. Míg az országos vizsgálatoknál elsősorban kvantitatív módszereket alkalmaztak, addig az egyes városrészek átalakulását kvalitatív módszerekkel is vizsgálják.

A TÁMOP 4.2.2. pályázatán nyertes AGRIA-INNORÉGIÓ (Modellrégió) c. pályázatban a CSFK FTI konzorciumi partner feladata a célirányos komplex tájértékelés, valamennyi tájalkotó tényező együttes figyelembe vételével. Konfliktus vizsgálat, a jelenlegi földhasználat összevetése az alkalmassági térképpel, tehát annak vizsgálata, hogy az adott területet arra használják-e, amire a legalkalmasabb. A vizsgálatot pontértékelés módszerével földrajzi információs rendszer keretei között végzik. Javaslatot tesznek az esetleges változtatásokra. Energianövények termesztésére vonatkozó alkalmassági térkép elkészítése. Társadalmi-gazdasági minősítés. Végző konfliktus és alkalmassági elemzés: ökológiai és ökonómiai szempontok figyelembe vételével mely területek javasolhatók megújuló energiák termesztésére.

„Residential Environment in V4 countries and Armenia” (HEAS) IVF (Nemzetközi Visegrádi Alap) Small Grant projekt. A HEAS projekt célja életminőség és lakókörülmények felmérése, értékelése és összevetése a visegrádi országok kiválasztott mintaterületein és Jerevánban. A projekt elsődleges célja egy fiatal kutatókból álló városföldrajzi kutatást végző hálózat kialakítása, amely a későbbiekben együtt tudna komolyabb, hosszabb, terepmunkával egybekötött kutatást végezni. Résztvevők: Szlovák Tudományos Akadémia Földrajzi Intézete (Pozsony), Jagelló Egyetem (Krakkó), Masaryk Egyetem (Brno), Jereváni Állami Egyetem.

Szintén a Nemzetközi Visegrádi Alap V4 – Eastern Partnership Programme Flagship Project keretében nyert az MTA CSFK FTI összesen 60.000 eurót. A 2012. szeptembertől 2014. tavaszig tartó, „Migration between Eastern Partners (Belarus, Georgia, Ukraine, Moldova) and the Visegrad Countries” (EASTMIG) című projekt kutatásban az FTI-n kívül 3 visegrádi (prágai Károly Egyetem, a Varsói Egyetem, a pozsonyi Comenius Egyetem) és 4 keleti partner vett részt (Belarusz Állami Egyetem, az Ukrán Nemzeti Tudományos Akadémia Földrajzi Intézete, továbbá a Transznisztriai Állami Egyetem (Tiraszpol) és a Tbiliszi Állami Egyetem). A projekt fő célja a V4-ek és a Keleti Partnerek között zajló általános migrációs folyamatok feltárása, összefoglalása, és ezen eredmények könyv formájában 2014 tavaszáig való publikálása.

Nemzetközi Visegrádi Alap további támogatásának köszönhetően egy belarusz senior vendégkutató dolgozik az MTA CSFK FTI-ben 2013. augusztus 31-ig. Megítélt támogatás 3000 euró.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kocsis K, Tátrai P (szerk.): A Kárpát-Pannon-térség változó etnikai arculata / Changing ethnic patterns of the Carpatho-Pannonian area. Budapest: MTA CSFK Földrajztudományi Intézet, 2012. (ISBN:978-963-9545-38-0)
2. Dövényi Z (szerk.): A Kárpát-medence földrajza. Budapest: Akadémiai Kiadó, 2012. (Akadémiai kézikönyvek) (ISBN:978-963-05-9281-9)
3. Michalkó G Turizmológia: elméleti alapok. Budapest: Akadémiai Kiadó, 2012. (Turizmus szakkönyvtár) (ISBN:978-963-05-9216-1)
4. Jakab G, Szalai Z, Kertész Á, Tóth A, Madarász B, Szabó Sz: Biological geotextiles against soil degradation under subhumid climate: a case study. Carpathian Journal of Earth and Environmental Sciences, 7:(2) 125-134 (2012)
5. Kiss E: The impacts of the economic crisis on the spatial organization of Hungarian industry. European Urban and Regional Studies, 19:(1) 62-76. (2012)
6. Kis É: Reconstruction of Late Neogene paleoenvironmental changes in the area of Pannonhalma (Western Hungary) using granulometric methods. Zeitschrift für Geomorphologie, 56:(Suppl. 2.) pp. 105-120. (2012)
7. Kovács Z, Herfert G: Development Pathways of Large Housing Estates in Post-socialist Cities: an International Comparison. Housing Studies, 27:(3) 324-342. (2012)
8. Agárdi N: Automation of Compiling Dot Density Maps. Kartographische Nachrichten, 2: 71-74 (2012)
9. Varga Gy, Kovács J, Újvári G: Late Pleistocene variations of the background aeolian dust concentration in the Carpathian Basin: an estimate using decomposition of grain-size distribution curves of loess deposits. Netherlands Journal of Geosciences – Geologie en Mijnbouw, 91:(1-2) 159-171 (2012)
10. Kovács Z Residential segregation in Budapest before and after transition In: Maloutas T, Fujita K (szerk.) Residential segregation in comparative perspective: making sense of contextual diversity Aldershot: Ashgate, 2012. pp. 97-216. (Cities and Society) (ISBN:1409418731)
11. Centeri Cs, Akac A, Jakab G: Land Use Change and Soil Degradation in a Nature Protected Area of East-Central Europe. In: Aubrecht C, Freire S, Steinnocher K (szerk.) Land Use: Planning, Regulations, and Environment New York: Nova Science Publishers Inc., 2012. pp. 211-241. (Environmental Science, Engineering and Technology Environmental Remediation Technologies, Regulations and Safety)
12. Kertész Á: The forests of Lake Balaton catchment and their role in soil conservation In: Krecek J, Haigh M J, Hofer Th, Kubin E (szerk.) Management of mountain watersheds Dordrecht: Springer, 2012. pp. 209-217. (ISBN:978-94-007-2475-4)
13. Egedy T: The effects of global economic crisis in Hungary. Hungarian Geographical Bulletin 61:(2) 155-173 (2012)

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
FÖLDTANI ÉS GEOKÉMIAI INTÉZET

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

A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az intézet 2012-ben ugyan új szervezeti keretek között kezdte meg a munkáját, de tovább folytatta a korábbi időszakot meghatározó tevékenységét. Az intézet fő feladata a litoszféra anyagát, folyamatainak jobb megismerését célzó alapkutatások végzése, amelyek az ásvány-, kőzet-, és fluidum-képződés, az izotóp-geokémia, a környezetgeokémia és a szerves geokémia területén folytak.

A geokémia belső fejlődése, továbbá a természetes környezet állapotának megismerése, megőrzése és az életminőség javítása szempontjából egyre nagyobb jelentőségű környezettudományi kutatások az utóbbi időkben folyamatosan növekvő arányban jelentek meg az intézet tevékenységében. Ennek keretében folytatták a geoszférákban, illetve azok határfelületein végbemenő geokémiai folyamatok kutatását. Ezek közül elsősorban a múltbéli és jelenkori környezet állapotát és változásait, a nehézfémek geokémiai körforgalmát, a talajok, valamint a felszíni és felszín alatti vízbázisok, hévizek sajátosságait, továbbá az épített környezet és kulturális örökségünk egyes tárgyi emlékeit ért antropogén hatásokat vizsgálták.

A környezettudományi kutatások mellett az utóbbi években már háttérbe szorultak a korábban nagy hagyományokkal rendelkező és nemcsak a hazai szakmai közvélemény, de a nemzetközi tudományos közösség által is elismert geológiai alapkutatások. Ezek a litoszférát felépítő, a geodinamikai folyamatok rekonstrukcióját lehetővé tevő fontos magmás, metamorf és üledékes kőzettípusok és velük együtt előforduló fluidumok képződési folyamatainak pontosabb megismerését célozták. Folytatták továbbá az egyes hazai ásványi nyersanyagok képződését, migrációját és felhalmozódását eredményező, illetve befolyásoló geokémiai folyamatok kutatását is.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A földtani környezet geokémiai állapotának és változásainak vizsgálata

Talajgeokémiai kutatások. A vas vízhatású talajokban való viselkedését célzó, intézetek közti (FTI-FGI) OTKA kutatási projekt keretében röntgen-pordiffrakciós módszerekkel meghatározták a vizsgált terület talajainak (lápos réti talaj, karbonátos típusos réti talaj és csernozjomjellelű homoktalaj) ásványos összetételét és agyagásványos karakterét. Megállapították, hogy azok nagy mennyiségben tartalmaznak különböző összetételű karbonát-ásványokat, uralkodóan kalcitot, alárendelten dolomitot, helyenként szideritet. Mindhárom talajtípus uralkodó agyagásványa a szmektit. Mellette nagyon kevés illit és klorit jelenhet meg. A vízhatású talajokban domináns szmektit kis rétegtöltésű, vegyesen montmorillonitos és beidellitese karakterű. A vasásványok közül figyelemre méltó a goethit mennyisége a glejes talajok vörös rétegeiben. A goethit a kolloidális méretű frakcióban is jelentős mennyiségben van jelen, ennek következtében kiemelkedő szerepe van a nyomelemek, nehézfémek megkötésében, eloszlásában. A glejes talajok kék színű redukált rétegeiben vivianit a fő vasásvány. A három vasásvány: a goethit, a vivianit és a sziderit együtt, egymás mellett is megjelenik. Ez alapján a képződési körülmények elég szűk Eh-pH tartományát lehet kijelölni.

Ezek a vasásványok többnyire szezonális vagy egyedi mélységszerinti eloszlásban jelennek meg a vizsgált talajokban. A nyomelemek közül az arzén nagyobb mennyiségben kötődik a rosszul kristályosodott vas-oxidokhoz, ez a jelenség egyelőre a Co, Cu, Ni, Pb és Zn esetén nem mutatható ki. Egy vasban gazdag (goethit) talajon végzett rézszorpciós kísérlet eredménye alapján a teljes talaj akár 1% réz megkötésére is képes.

Kémiai kioldásos vizsgálatokkal jellemezték a legelterjedtebb hazai talajtípusok vastartalmát. A talajok teljes vastartalma és megoszlásának változása a szelvényen belül jól mutatja az egyes talajképző folyamatok típusát, helyét és utal a mértékére is. Ezek alapján egyes talajtípusok határozottan elkülöníthetők. Eredményeik szerint a talaj vastartalmának szekvenciális kioldása fontos információt nyújthat ezen folyamatokról, de a helyben képződött vagy átöröklött vasfázisok arányáról is. Eredményeik arra is utalnak, hogy a duzzadó agyagásványoknak fontos szerepe lehet a helyben képződött vasásványok felhalmozódásában is.

Az agyagásványok talajbeli átalakulását és ennek környezeti jelentőségét kutató projekt keretében új, fontos eredmények születtek. Laboratóriumi kísérletekkel derítettek fényt arra, hogy a Ca-szmektit nehézfém-adszorpciós képessége, ellentétben a K-szmektittel, nem változik nedvesítés–szárítási ciklusok hatására.

Intézetek közötti (GGI-FGI) együttműködésben került sor kárpát-medencei löszök ásványtani, agyagásványtani vizsgálatára. A lösz anyagának eredetét érintő kutatás eredményei az egyik legtekintélyesebb geokémiai szaklapban jelentek meg. Kimutatták, hogy a hazai löszökre jellemző a magas dolomittartalom és ez korlátozza a Sr-izotópok használhatóságát a provenancia-kutatásban. Az agyagfrakció szmektites karaktere szintén egyedi. Mivel megjelenése mállásra is utalhat, megállapítható, hogy az agyagásványos összetétel alapján nem lehet származási helyre következtetni a Kárpát-medence esetében.

A fenti eredmények elsősorban alapkutatás jellegűek, de például a talaj-nehézfém kapcsolat mélyreható vizsgálatának eredményei megkönnyíthetik az esetleges talajszennyezések pontos elkülönítésének, lehatárolásának és viselkedésének megértését. Az eredmények fontos adatokat szolgáltatnak hulladéktárolók agyag védőrétege fejlődésének, változásának valamint talajok környezetszennyezőkkel szembeni puffer-kapacitásának megismeréséhez is.

Levegőben szállított porok vizsgálata. Levegőben szállított porminták (ülededő és szállóporok) részletes ásványtani és geokémiai vizsgálatával megállapították, hogy a nehézfémek (Cu, Pb, Zn) nagyobb koncentrációval, így a természetes háttértértekhez képest jóval nagyobb dúsulással jellemezhetők a szállóporokban, mint az ülededő porokban. Ez összefüggésben van a szállóporok jóval kisebb szemcseméretével. Transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatokkal megállapították, hogy a fő nehézfém-hordozó fázis a magnetit, de jelentős mennyiségű Zn lehet az agyagásványokban, és utóbbi elem előfordul karbonátokhoz kötődve, sőt önálló karbonát- és oxidfázisokat formájában is. A magnetitből, mállásnak ellenálló fázisként, csak nehezen mobilizálódnak a potenciálisan toxikus fémek, de az agyagásványok és karbonátok fontos forrásai lehetnek a mobilis nehézfémeknek a levegőben szállított porban.

A levegőben szállított por potenciálisan toxikus összetevőinek vizsgálata alapvető fontosságú a városi környezet emberi egészségre gyakorolt hatásának megismeréséhez. A nehézfémeket hordozó fázisok meghatározása ezen elemek emberi szervezetben esetlegesen kifejtett hatásának megbecsléséhez szükséges.

Paleoklimatológiai kutatások. Elkészült az első olyan geokémiai/paleoklimatológiai szintézis, amely régészeti feltárásokból származó kagyló és csontleletek stabilizotóp-adatait,

cseppkövek stabilizotópos és nyomelemgeokémiai eredményeit, valamint tavi üledékek diatómatartalmának oxigénizotópos adatsorát foglalja egységes képbe. Újszerű megközelítésként cseppkövekbe zárt fluidumzárványok hidrogénizotóp- és kalcitok oxigénizotóp-összetételeiből származó deutérium-többlet számítások történtek, amelyek alapján a kb. 2000-9000 év közötti időszakra jellemző csapadékszarmazási viszonyok változására derült fény. A csapadék atlanti, mediterrán vagy kontinentális területről történő szállítása az Észak-Atlanti Oszcillációval, az Atlantikumból benyomuló légtömeg hatásának változásával függ össze.

A Kárpát-medence holocén időszaki klímájának relatíve rövid időtartamú változásai mellett egy körösladányi szelvény részletes elemzésével elkészült a pleisztocén-holocén átmenethez tartozó erős klímaváltozás folyamatainak vizsgálata is. A pleisztocén legutolsó intenzív eljegesedési szakaszán belül több erőteljes felmelegedési esemény is lejajlott. Az eredmények alapján a Kárpátok hótakarója igen nagymértékű változásokat mutat, 10-20 ezer évvel ezelőtti nagyon hideg időszakon belül is volt a jelen korhoz hasonló mértékű hótakaró-csökkenés.

Hazai és több nemzetközi együttműködés keretében vizsgálták számos recens és fosszilis édesvízi mészkő stabilizotóp-geokémiai jellemzőit. A vizsgálatok hozzájárultak egy, a travertínoképződést leíró empirikus egyenlet létrehozásához, ami a karbonátkiválás hőmérsékletének korábbiaknál jóval pontosabb kiszámítását teszi lehetővé.

A fenti vizsgálatokkal a földtörténeti közelmúlt klíma- és környezetváltozásait lehet nyomon követni. A múltbeli klímaváltozások folyamatának megértésével a paleoklimatológia nagymértékben járul hozzá a jövőbeli klímaváltozások előrejelzéséhez.

Vízgeokémiai kutatások. A Szentendrei-szigeten végzett oxigénizotóp mérések eredményeit sikerült beépíteni egy diszperziós fekete doboz modellbe. A modellezés segítségével olyan módszer került kidolgozásra, amivel – a szakirodalomban eddig nem ismert módon – különböző vízállásoknak megfelelően időszakokra bontva lehetett számításokat végezni adott csáposkút vízutánpótlási viszonyaira vonatkozóan (szivárgási idő, Duna-víz/háttérvíz részarány, diszperzió). A terület jobb megismerése érdekében egy hidraulikai modell is készült FeFlow szoftver segítségével. Ezek az eredmények hozzájárulnak ahhoz, hogy a Fővárosi Vízművek Zrt. ezt a jó minőségű vízbázist, amely több mint 1,5 millió embernek biztosítja a napi vízszükségletét, biztonságosan tudja üzemeltetni. A szigetközi kutak trícium koncentrációinak adataira ugyancsak diszperziós fekete doboz modell épült, aminek segítségével azon a területen is sikerült a Duna-víz felszín alatti mozgását leírni.

Elkészült továbbá a korábbi évek során vizes pirolízis kísérletekben vizsgált aromás szerves anyag termékek és a hévizekben megfigyelt aromás szerves anyagok eloszlásának (koncentrációk, egyes vegyületek arányai) összehasonlítása. Az eredményekből egy PhD értekezés készült el, aminek védelme 2013 elején várható.

A kulturális örökség tárgyi emlékeinek vizsgálata. Folytatták az OTKA által támogatott habán ónmáz kerámiák (fajanszok) készítési technikájának feltárását célzó archeometriai kutatásokat. „Mázmaradékoknak” és „máz nyersanyagoknak” minősített régészeti leletek anyagvizsgálatát végezték el, amelyek a habán kerámiakészítés korai (16. sz. második fele - 17. sz. eleje) időszakát képviselő morva habán telepekről származnak. A „mázmaradékok” színes mázak fritjeinek, azaz a máz alkotórészeinek előzetes összeolvasztásából keletkező üveges anyagnak bizonyultak. Az ón-oxid jelenléte a mázfritekben arra utal, hogy nemcsak a fehér ónmáz, de a színes mázak is átlátszatlanok (opakok) voltak. A sárga mázban ólom-ón antimonát fázist azonosítottak, amely a habán fajanszokban eddig még nem ismert pigment. A „máznyersanyag” összeállt és erőteljesen mállott, nyers (nem megolvadt) mázfrit.

A grafitos kerámiák provenienciát vizsgálata kiterjesztve elvégezték egy soproni 8–9. sz.-i lelőhely anyagainak eredet-meghatározását. Az eddigi ismeretekkel ellentétben az ausztriai grafiteredet bizonyítására tettek javaslatot, a grafitrögök jarosit fázisa és nyomelem-karaktere alapján.

Jelentős eredmények születtek az aquincumi finomkerámiák provenienciájának kutatásában is, amennyiben feltárták a potenciális nyersanyag-lelőhelyeket, kimutatták a kerámiák jellemzőinek változását négy évszázadra, és kidolgozták egy kerámia adatbázis alapjait.

A Római Birodalomban híresen egységes módon készítették az üveget. A különböző tartományokban készült üvegeket természettudományos módszerekkel próbálják kisebb-nagyobb sikerrel elkülöníteni egymástól. A Brigetióban feltárt római kori üvegekészítő műhely átlátszó üvegből készült töredékein végeztek archeometriai (elektron-mikroszkóp) vizsgálatokat, amelyek az első ilyen jellegű vizsgálatok pannoniai leleteken. Vizsgálati eredményeik egyrészt megerősítették azt a régészeti megfigyelést, hogy középkori töredék is került a leletek közé, másrészt kimutatták, hogy a brigetiói műhelyben is a Római Birodalomban megszokott módon, homok, natúr szóda és mészkeverék összeolvasztásával készítették az üveget, szintelenítőnek pedig mangánt adagoltak hozzá.

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.

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

Magmás kőzettani-geokémiai kutatások. A Balaton-felvidéki Bondoró-hegy 2.29 millió éves alkáli bazaltját vizsgálták részletesen elektron mikroszkóppal. A Bondoró-hegy a dunántúli vulkáni terület egyik utolsó kitörését képviseli, és a kiömlött bazalt láva szokatlanul sok idegen eredetű kőzetdarabot (xenolitot) és xenokristályt tartalmaz. A szöveti és az ásványkémiai vizsgálatok alapján a xenokristályok legnagyobb része a felsőköpenyből származik, de megtalálhatók az alsókéreg eredetű xenokristályok, illetve a mélyben (köpeny-kéreg határ közelében) megkezdett bazális magmákból kristályosodott pegmatit erek darabjai is. A nagymennyiségű xenokristály jelenléte a felnyomuló magma és a felsőköpeny, valamint az alsókéreg anyagának intenzív kölcsönhatását mutatja. A felsőbb szintekről (középső és felsőkéreg) származó anyag hiánya (vagy ritkasága) a felnyomás sebességének a megváltozására utal. A xenolitok és a xenokristályok alapján a magma néhány óra, de legfeljebb 1-2 nap alatt nyomult a felsőköpeny szintjéről a felszínre.

Összegezték a korábbi évek köpenygeokémiai kutatási eredményeit az amfibolok stabilizotópos és nyomelem-geokémiai adataiból kialakítható genetikai kép általános értékelése segítségével.

A metamorf és magmás kőzettani-geokémiai kutatások alap kutatás jellegűek, közvetlen gyakorlati jelentőségük nincs.

A hazai ásványi nyersanyagok kutatása. Kőolajok hőstabilitásával kapcsolatban összevetették a programozott felfűtési sebességű és izoterm hőkezelések, valamint a vizes közegben történő hőkezelés eredményeit. Továbbra is folyik az eredmények kőolajipari alkalmazásának fejlesztése.

Megalkották a feketepala környezetű karbonátos mangánérc két lépcsős (két ciklusú) mikrobiális keletkezési modelljét, amely szerint az első ciklusban aerob chemolithoautotróf mikrobiális folyamatok keretében az ércanyag Mn oxidos előércként felhalmozódik, majd a

második ciklusban anaerób heterotróf mikrobiális folyamatok során mangán karbonáttá alakult át.

Az úrkúti jura feketepala környezetű karbonátos Mn érc főtelepének vizsgálatai alapján kidolgozásra került egy olyan képződési időtartamot becsülő módszer, ami mikrobiális rétegzettségén alapul. Ennek az a lényege, hogy ha egy mikroba fajta a populációs növekedési periódusainak csak bizonyos szakaszában „ásványosít”, akkor alkalmas lehet mikrobiális rétegzettségén alapuló időtartam becsülésre (a Fe- és Mn-oxidálók kiválóak, elterjedtek, színesek). A kutatás megállapította, hogy a karbonátos mangánérc mm-es rétegzettségét Fe-dús mikrobiális szövetek sorozata alkotja, és szintén először történt meg a mikrobiális mangán dúsulási rétegek 100-300 mikrométeres rétegecskék formájában történő kimutatása SEM-EDS módszerrel és Lomb típusú periodicitás vizsgálattal. A módszer alkalmazásával az óriási méretű úrkúti karbonátos mangánércesedés keletkezése mintegy 500 év időtartamra becsülhető. Az üledékben a közel 200 millió év távlatában 3-5 napos időtartamot képviselő mikrorétegek nyomozhatók.

A hazai nyersanyagok genetikájának vizsgálata a készletbecsléshez és a kitermeléshez nyújt fontos alapadatokat. Az eredmények gyakorlati hasznosítása a környezetszennyezés és elhárítás, a környezet-geokémiai folyamatok, valamint a bánya-rekultivációs tevékenység keretében hasznosulhat.

Módszerfejlesztés

Sikerült egy olyan mintafeltárási és mérési módszert kifejleszteni, amely során különböző geológiai mintákból felszabaduló H₂O hidrogén- és oxigénizotóp összetételének egyidejű mérése válik lehetségessé lézerspektroszkópia segítségével. A két izotóp egyidejű mérése a módszer legfontosabb előnye a korábbi tömegspektrométeres eljárással szemben, ahol külön feltárási folyamatot igényelt a D/H és ¹⁸O/¹⁶O izotóparányok mérése, amely szükségszerűen kérdéssé tette azok mintazonosságát. A módszer további előnye, hogy kisebb mintamennyiségek mérése is lehetséges (akár 0,5 µl vízmennyiségből keletkezett vízpára), valamint kisebb az üzemeltetés költsége.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet aktív szerepet vállalt a 2012 novemberében a Magyar Földtani és Geofizikai Intézetben megrendezett Földtudományi Forgaton, ahol a két napos rendezvényen több száz látogató jelent meg az intézet standjánál. Az intézet dolgozói ásvány- és kőzetbemutató, geokémiai showműsor, interaktív fejtörők segítségével ismertették a nagyközönséggel a geokémiai kutatás módszereit és eredményeit. A paleoklimatológiai eredmények az MTI híreiben jelent meg, amit számos más hírportál is átvett.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

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

Az intézet az MTA Geokémiai, Ásvány- és Kőzettani Tudományos Bizottság, valamint a PAGES (Past Global Changes) projekt keretében három olyan rendezvényt szervezett, amelyen a résztvevők száma meghaladta az ötvenet. Az intézet egy kutatója meghívott előadónak és szekcióvezetőként vett részt a bécsi European Geosciences Union több mint tízezer fős kongresszusán, valamint a kb. 250 fős törökországi Geochemistry Symposiumon és a németországi JESIUM konferencián.

Az MTA Környezetgeokémiai Albizottságával közösen megrendezték a Környezetgeokémiai ankét-sorozat keretében „A nikkelt és kobalt környezetgeokémiája” és „A bór környezetgeokémiája” című, 1-1 napos ankétokat.

Az intézet egy kutatója részt vett a Nemzetközi Hidrogeológiai Szövetség Ásvány- és Hévíz Bizottsága (IAH CMTW) 2012. évi Műhelytalálkozásának megszervezésében.

Elindítottak egy horvát-magyar együttműködést, amelynek keretében több horvátországi barlang karbonát képződményeinek vizsgálata és monitoringja válik lehetségessé.

Az intézet egy kutatója szemináriumot tartott az archeometriai kutatás módszertanáról az MTA Bölcsészettudományi Kutatóközpont Régészeti Intézet kutatóinak.

Az intézet 6 kutatója vett részt a felsőoktatásban, összesen 13 kurzus keretében az alábbi egyetemeken: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szegedi Tudományegyetem, Pécsi Tudományegyetem, Pannon Egyetem, Magyar Képzőművészeti Egyetem.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A tárgyévben elnyertek egy 4 éves, összesen 21,744 M Ft-os költségvetésű OTKA kutatást. Ennek keretében szorpciós kísérletek és szelektív kioldások alkalmazásával integrált vizsgálatával igyekeznek részletesen jellemezni a talajalkotó ásványfázisok szerepét néhány nehézfém (Pb, Cu, Zn, Cd) talajbeli megkötődésében. Laboratóriumi kísérletekben vizsgálják a pH, más nehézfémek jelenléte vagy hiánya, valamint a nehézfémek megkötésében közvetlenül vagy közvetve szerepet játszó talajalkotó fázisok (szerves anyag, agyagásvány, vas-oxidok, karbonátok) jelenlétének vagy hiányának hatását a nehézfémek megkötődésére a talajalkotó ásványszemcséken. A kutatásnak helyet adó intézetben kidolgozott komplex környezetgeokémiai megközelítéssel a talajásvány-nehézfém kölcsönhatást befolyásoló ásványtani és geokémiai jelenségekkel kapcsolatos ismereteink várhatóan nagymértékben bővülni fognak.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Czuppon Gy, Harangi Sz, Lukács R, Mason PRD, Ntaflós T: Mixing of crystal mushes and melts in the genesis of the Bogács Ignimbrite suite, northern Hungary: an integrated geochemical investigation of mineral phases and glasses. *Lithos*, 148: 71-85 (2012)
2. Demény A, Harangi S, Vennemann TW, Casillas R, Horváth P, Milton AJ, Mason PRD, Ulianov A: Amphiboles as indicators of mantle source contamination: Combined evaluation of stable H and O isotope compositions and trace element ratios. *Lithos*, 152: 141-156 (2012)
3. Fekete J, Sajgó C, Kramarics Á, Eke Z, Kovács K, Kárpáti Z: Aquathermolysis of humic and fulvic acids: Simulation of organic matter maturation in hot thermal waters. *Organic Geochemistry*, 53: 109-118 (2012)
4. Polgári M, Hein JR, Vigh T, Szabó-Drubina M, Fórizs I, Bíró L, Müller A, Tóth LA: Microbial processes and the origin of the Úrkút manganese deposit, Hungary. *Ore Geology Reviews*, 47: 87-109 (2012)
5. Polgári M, Hein JR, Tóth AL, Pál-Molnár E, Vigh T, Bíró L, Fintor K: Microbial action formed Jurassic Mn-carbonate ore deposit in only a few hundred years (Úrkút, Hungary). *Geology*, 40: 903-906 (2012)
6. Schöll-Barna G, Demény A, Serlegi G, Fábrián S, Sümegi P, Fórizs I, Bajnóczi B: Climatic variability in the Late Copper Age: Stable isotope fluctuation of prehistoric *Unio pictorum* (Unionidae) shells from Lake Balaton (Hungary). *Journal of Paleolimnology*, 47: 87-100 (2012)

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

GEODÉZIAI ÉS GEOFIZIKAI INTÉZET

9400 Sopron, Csatkai u. 6-8.; 9401 Sopron, Pf. 5.

telefon: (99) 508 343; fax: (99) 508 355

e-mail: wesztergom.viktor@csfk.mta.hu; honlap: www.ggki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A geodéziai és geofizikai alap kutatások tárgya a Föld-rendszer fizikai állapotának és folyamatainak megfigyelése, modellezése, értelmezése, valamint az ezekhez kapcsolódó elméleti és gyakorlati (matematikai, fizikai) módszerek, vizsgálati eszközök fejlesztése, létrehozása. Az alapfeladatok körébe tartozik az országos szeizmológiai hálózat és szolgálat fenntartása, a szilárd Föld és a Föld körüli térség (geodinamika, geomágneses tér, aeronómia) folyamatos obszervatóriumi megfigyelése, a nemzetközi együttműködésekkel járó adatszolgáltatási feladatok ellátása, időszakos megfigyelőrendszerek működtetése. Az intézet alap kutatási tevékenységével összefüggésben részt vállalt természeti kockázatok elemzésében, a hazai és az európai kritikus infrastruktúra védelmében.

A geofizika és a geodézia módszereit és a kutatás közvetlen tárgyát tekintve is rendkívül sokszínű. Az alap kutatások és az alkalmazott kutatások között átjárhatóság van, a kutatóközpont más intézeteinek tevékenységével pedig sok a csatlakozási felület.

A 2012. évi strukturális átalakítás a kutatóközpont intézetei közül a GGI-t érintette a legmélyebben. Az intézetben 12 vezető kutató vállalkozott arra, hogy önálló projektet, kutatócsoportot kezdeményezzen, ebből 8 geofizikai, 3 klasszikusan geodéziai és 1 interdiszciplináris kutatási téma. A kutatóközpont lehetőséget teremt az intézetek, így a kutatási projektek akadálymentes együttműködésének, és teljesen új, közös projektek kialakításának.

Pályázati forrásból a geofizikai kutatási infrastruktúra nagymértékű fejlesztése valósult meg.

Az egyetemekkel fenntartott oktatási és szakmai kapcsolatok segítenek a kutatói utánpótlásban, közös projektek révén pedig többlet-erőforrásokat tudtak az intézeti kutatásokba bevonni.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Magyar Nemzeti Szeizmológiai Hálózat (MNSzH)

Az MNSzH a 2012. évi szeizmológiai adatok feldolgozása során mintegy 5000 fázisadatot határozott meg, ezek alapján 39 földrengést azonosított a Kárpát-medence területén. 5 rengés esetén sikerült az események fészekmechanizmusát is meghatározni.

Az elmúlt évben a szeizmológiai hálózat három új, online, szélessávú szeizmológiai állomással bővült. Márciusban elindult a regisztrálás az új mórágyi állomáson, májusban került végleges helyére és vált az interneten keresztül elérhetővé a létavérsesi állomás, decemberben pedig a Magyar Földtani és Geofizikai Intézettel együttműködésben, bekapcsolódott az MNSzH-ba a tihanyi állomás.

A Paksi Atomerőmű támogatásának köszönhetően 2012-ben két további szélessávú állomás létrehozásához szükséges műszerek beszerzésre kerültek az MTA CSFK GGI-ben. Az állomások lehetséges helyszínének kiválasztásához megkezdődtek a zajvizsgálatok.

2012-ben jelent meg először a Magyar Nemzeti Szeizmológiai Bulletin, melynek külön magyar és angol nyelvű kötete tartalmazza a Magyarországon és környezetében keletkezett rengések fészekparamétereit és fázisadatait, több rengés fészekmechanizmus megoldását, az érezhető rengések makroszeizmikus jellemzőit, valamint az MNSzH állomásai által detektált teleszeizmikus események fázisadatait.

Elméleti szeizmológia

Ötven Magyarországon keletkezett földrengés spektrális analízise alapján a momentum magnitúdó és a lokális magnitúdó között egy lineáris összefüggést állítottak fel. Megállapították, hogy a szeizmikus momentum és a feszültségcsökkenés nagysága között egyértelmű kapcsolat nem mutatható ki.

Meghatározták az oroszlanói földrengésnek (2011.01.29. M4.5) és két nagyobb utóregésének fészekmechanizmusát hullámforma inverziós eljárás alkalmazásával. A kapott inverziós eredmények mindhárom vizsgált eseményre balos oldaleltolódást valószínűsítene, ahol a közel függőleges vetősík csapásiránya vagy É-D, vagy K-Ny.

A Pannon-medence litoszférájában kialakuló Rayleigh-hullám csoportsebességeket egy olyan módszerrel tanulmányozták, amely a mikroszeizmikus zaj keresztkorrelációján alapszik. A 7-30s közötti periódusidő tartományban meghatározták a Rayleigh-hullámok fundamentális módusainak csoportsebességeit. A csoportsebesség eloszlás térképek alapján megállapították, hogy alacsony sebességgel jellemezhető régiók találhatóak a vastag üledékekkel rendelkező területeken, és nagy sebességű anomáliák a hegységek alatt. A nagyobb periódusidőkhöz tartozó felületi hullámok mélyebben elhelyezkedő szerkezeti elemeket reprezentálnak. A 28 s-os periódusidőnél pozitív sebességanomáliát találtak a mély üledékes medencék alatt, ami a kéregbeli és köpenybeli szerkezeti elemek együttes hatásaként értelmezhető.

Szeizmotektonika, földrengés-veszélyeztetettség kutatások

A Föld globális szeizmicitásának vizsgálatával kapcsolatosan megállapították, hogy a földrengések energia eloszlása az egyenlítőhöz képest bimodális, ami arra utal, hogy a Föld forgásának dinamikája modulálja a hosszúperiódusú tektonikai folyamatokat.

A hipocentrum meghatározás pontosítására vizsgálatokat végeztek – az együttes inverziós eljárások közül – a kettős különbség módszer alkalmazhatóságára. Az eljárást a Vértes környezetében 2011-ben keletkezett, valamint a Berhida környéki földrengések relokalizációjára alkalmazták. A módszer alkalmazásával a hipocentrumok a szokásos eljárással számítottáznál kisebb hibával határozhatók meg, és alkalmasak lehetnek a pontosabb szeizmotektonikai értelmezésre.

Eljárást dolgoztak ki a természetes és mesterséges eredetű rengések elkülönítésére a 2012. évi oroszlanói földrengés utóregéseit, és a területen működő kőbányák robbantási adatait felhasználva. Elemezték az események hullámformáit és amplitúdó spektrumait, vizsgálták a P hullám polaritásokat és a különböző fázisok amplitúdó arányait, a hullámformák hasonlóságát. A módszerek együttes, komplex alkalmazásával a robbantások és a mikroregések jól elkülöníthetők a vizsgált területen.

Meghatározták a földrengés-veszélyeztetettség számításokban használt momentum magnitúdó (M_w) és egyéb (M_L , M_S , m_b , M_D) magnitúdó típusok közötti összefüggéseket.

Intenzitás-eloszlás, valamint determinisztikus földrengés-veszélyeztetettség számítását végeztek Dunaszekcső környezetére; megállapították, hogy ötös intenzitású talajmozgás (megközelítően 0.025g gyorsulás) is előfordulhat Dunaszekcsőn, ami már a földcsuszamlásokra is jelentős hatással lenne.

Paleoszeizmológiai kutatások

A korábban már megkezdett speciális alakú, sérülékeny és sértetlen álló cseppkövek paleoszeizmológiai vizsgálatát 2012-ben a Baradla-barlang folytatásában lévő Domicabarlangban (Szlovákia) folytatták.

Törött cseppkövek alapján meghatározták a sűrűség, Young-modulus és a törőszilárdság értékeit. Sértetlen álló cseppkövek gerjesztésével megállapították azok sajátfrekvenciáját. A mechanikai paraméterek ismeretében elméleti számításokkal ugyancsak meghatározták a sajátfrekvenciát és azt a maximális horizontális talajgyorsulás-értéket, amire a jelenleg sértetlen állócseppkő már eltört volna.

Az elméleti számítások útján nyert talajgyorsulás-érték (0.06g), szinte teljesen megegyezik a korábban megvizsgált, a Baradla-barlang Olimposz termében található, cseppköre kiszámított törést okozó értékkel. A mérések és az elméleti számítások alapján megállapították, hogy a Baradla és a Domicabarlang környezetében található geológiai szerkezetek az elmúlt néhány ezer évben nem gerjeszthettek akkora nagyságú paleorengést, ami 0.06g horizontális talajgyorsulás-értéknél nagyobbat produkált volna. Ekkora gyorsulás-értékek már akár közepes nagyságú rengések esetén is előfordulhatnak.

Geoelektromos kutatások

Összefüggést mutattak ki az egyenáramú geoelektromos szondázási elrendezések paraméter-érzékenység térképeinek (PÉT) maximális értékei és a kimutathatósági mélység (KMM) értékek között a korábbi, hagyományos elrendezésekre végzett KMM számítások eredményei alapján. Vizsgálatokkal bizonyították, hogy a $\gamma 11n$ elrendezések következetesen (akár 2-2.5-szeresen) nagyobb KMM értékeket adnak, mint akár a legnagyobb KMM értékű hagyományos elrendezések. A szintén vizsgált Wenner- γ kvázi-null elrendezés ugyanakkor csak átlagos KMM értéket produkált és az optimalizált Stummer elrendezés sem bizonyult jobbnak a legjobb hagyományos elrendezéseknél.

Vizsgálták a MAN, Wenner- γ ($W\gamma_n$) és a Schlumberger (S_n) null elrendezések alkalmazását egy teszt terület (les-breulex-i kőfejtő) töréses szerkezetének kimutatására. A terepi mérések megmutatták, hogy jóllehet az S_n elrendezés több szerkezetet mutatott ki, mint a MAN, a $W\gamma_n$ az egyetlen null elrendezés, ami az összes horizontális inhomogenitás kimutatására képes volt. Az alkalmazott hagyományos geofizikai módszerek csak a fő töréses zóna detektálására volt alkalmas, de a kisebb szerkezeteket egyik sem tudta kimutatni.

Kimutatták, hogy a szerkezetirány legjobban a S_n és a MAN elrendezések együttes alkalmazásával határozható meg: a MAN teszi lehetővé a helyes irány kiválasztását az egyébként azt nagyon pontosan meghatározó S_n által kijelölt két irány közül.

Geodinamikai folyamatok megfigyelése és modellezése

Párhuzamos extenzométeres és radonmérések eredményeiből kimutatták, hogy a hosszúperiódusú tartományban a radonkoncentrációt lényegében a külső hőmérséklet befolyásolja (16-19 kBq/m³/°C), amely mellett a légnyomás hatása (1-10 Bq/m³/hPa) elhanyagolható. A radonkoncentráció a napos és félnapos (árapály) strain változásokat nem követi, a hosszúperiódusú változás pedig: 0.04-0.015 kBq/m³/nstr között van és az akkumulálódott strain-nel csökkenő tendenciát mutat. Az eddigi vizsgálatok alapján az sejthető, hogy nagy strain változás esetében a radonkoncentráció nemlineárisan változik, amely további hosszúidejű vizsgálatot igényel.

Továbbfejlesztették a GPS bázisvonal kiegyenlítő programot úgy, hogy a kiegyenlítés során egy előző időponthoz viszonyított globális hasonlósági transzformáció paramétereit is egy

lépésben lehet meghatározni a koordináta változásokkal együtt. Numerikus lemeztektonikai modellel szimulált adatok alapján kimutatták, hogy a tektonikai lemezen belüli deformációkat ezzel az eljárással meg lehet határozni úgy, hogy a globális mozgások nem torzítják az eredményeket.

A dunaszekcsői partcsuszamlás kinematikai és dinamikai modellje geodéziai megfigyelések alapján projektben további mérési kampányokat végeztek. Vizsgálták a pontok mozgástendenciáit a kinematikus modell hagyományos kiegyenlítéssel és Kálmán-szűréses eljárással való megoldásával. Az eredmények alapján kidolgoztak egy „kvázi” rugalmas-elasztikus modellt a partcsuszamlás jelenségének a leírására.

Gravitációs kutatások

Az európai kontinens legfrissebb szeizmikus Mohorovičić térképe alapján előállították a felső köpeny több mint 300000 poliéder térfogatelemből álló, 10 km×10 km vízszintes felbontású 3D modelljét, a modell kiterjedése $[-10^\circ, 40^\circ] \times [35^\circ, 65^\circ]$ miatt a sík közelítés már nem alkalmazható. Az ETOPO1 domborzatmodell alapján levezették a topográfiai közettömegek 3D modelljét a $[10^\circ, 30^\circ] \times [40^\circ, 55^\circ]$ koordinátákkal határolt területen, 3.6 km×3.6 km felbontásban. Kiszámították a két modellben összesen 921000 térfogatelemmel leírt sűrűségeloszlás tömegvonzási potenciálja második deriváltjait (az Eötvös-tenzor elemeit) a GOCE gradiométeres műhold Közép-Európa feletti mérési pontjaiban.

Továbbfejlesztették az ALCAPA térség topográfiai közettömeg-eloszlását derékszögű hasáb térfogatelemekkel leíró 3D modelljét az SRTM3 felszínmodell segítségével. Geológiai adatok felhasználásával Magyarország, valamint a Cseh- és Szlovák Köztársaságok területén pontosították a több mint 7000000 térfogatelemből álló modell sűrűségeloszlását, majd meghatározták a nehézségi tér rendellenességeinek hatását a helymeghatározó koordinátákra. Az eredmények eltérése a korábbiaktól jól interpretálható a modellben eszközölt változtatásokkal.

Kvarter környezetváltozások és felszíni folyamatok kutatása

Agyagásványtani, Sr-Nd izotópos és cirkon U-Pb koradatok segítségével kísérelték meg azonosítani a hazai lösz üledékek lehordási területeit. A löszben lévő finom por legalább egy kis részének szaharai eredetét a Sr-Nd izotópos vizsgálatokkal nem lehet kizárni. A munka rámutat a vizsgált löszök finom frakcióinak ($<5 \mu\text{m}$) és a grönlandi jégfűrés magokban az LGM (legutolsó glaciális maximum) során lerakódott por igen hasonló agyagásványtani és Sr-Nd izotópos összetételére, felhívva ezzel a figyelmet a grönlandi jégbe zárt por további vizsgálatának szükségességére. A munkát kiegészítették egy a hazai löszök szemcseösszetéti eloszlására építő elemzéssel, ami az utolsó glaciális periódus kárpát-medencei háttérpor atmoszférikus koncentrációjára adott becsléseket. A cirkon adatok szerint a löszben található nehézasványok egy nagy része a folyók üledékéből, illetve a felhalmozódási helyhez közel eső helyi kőzetekből származhat. A Danitz-pusztai pannon homok cirkonjainak vizsgálata közvetett bizonyítékot szolgáltatott a Tisia-terrénum kevert prevariszkuszi protolitjairól.

Ősgerincesek fogzománcának és agyar dentinjének $\delta^{13}\text{C}$ és $\delta^{18}\text{O}$ összetételét elemezve új adatokat nyertek a Kárpát-medence és ÉNy-i peremi régiói 33 és 12 ezer évvel ezelőtti őskörnyezeti viszonyaihoz. Míg a szén stabilizotóp adatok a C3-as növényzet dominanciájára utalnak, a rekonstruált őshőmérsékleti adatok széles skálán mozognak. A legalacsonyabb éves középhőmérséklet (2.4°C) egy az LGM-re datált csontmaradványból származnak (Zóki mamut) és a glaciális maximum és a Holocén kezdete közötti hőmérsékletváltozás nagyságára 8.6°C -os értéket kaptak, jó egyezésben datált rétegvizekből származó nemesgáz hőmérsékleti adatokkal.

Légköri elektrodinamika kutatások

Elemezték a Közép-Európa felett 2007 és 2009 között megfigyelt vörös lidércek optikai tulajdonságait, azokat alaktanilag osztályokba sorolták. Megállapította, hogy az egyes emissziókon, besorolástól függetlenül, jellegzetes morfológiai struktúrák jelennek meg. Foglalkoztak a Tejút egy távoli neutron csillagából (SGR 1806-20”) érkező gamma-sugár Föld-ionoszféra üregrezonátorra gyakorolt hatásával, amely ún. parametrikus Schumann-rezonancia (SR) gerjesztést idézett elő, s többek között a nagyceki SR-mérőrendszerben pozitív polarizációjú tranziensként jelent meg, ukrán kutatók modell-számításaival összhangban.

Vizsgálták a római ionoszonda állomás DPS-42 ionogramjai alapján a szporadikus E réteg paramétereit (kritikus frekvencia, látszólagos magasság) két különböző statisztikai módszer segítségével a zivatarok és az alsó ionoszféra közötti csatolási mechanizmusok (légköri gravitációs és/vagy elektromágneses hullám) feltárására. A szuperponált időszakok módszerével egy szignifikáns csökkenés adódott a kritikus frekvenciában a villámok időpontját követően, ami egy hirtelen elektronsűrűség csökkenés jele a szporadikus E rétegben.

Tanulmányozták az SR frekvencia-értékek helyettesíthetőségét a vertikális elektromos térkomponensben (E_z) az SR jelenség hullámhosszához képest kicsiny távolságra levő két obszervatórium, Nagyceki és Belsk (Lengyelország) SR mérései esetében. Megállapították, hogy az első két módus adatai jól helyettesítik egymást, a harmadik E_z módus frekvenciaváltozásai a két obszervatóriumban, pedig indikátorai lehetnek az afrikai zivatarregió meridionális dinamikájának a tanulmányozására. Az SR amplitúdók változásában a galaktikus kozmikus sugárzással összefüggésbe hozható modulációt találtak.

Magnetoszféra és űrplazma kutatások

Vizsgálták az iongyorsítás folyamatát a földi kvázi-párhuzamos lökéshullám előtti térségben. A hatékony, ún. elsőrendű Fermi-gyorsítás alapvető eleme a gyorsítási folyamat kezdete (injection), amely feltételezi olyan ionok jelenlétét (seedions), amelyeknek energiaszintje valamivel magasabb, mint a napszél ionjainak energiája. Ilyen ioncsoport keletkezésére eddig csak elméleti megfontolásokból következtettek. Francia kutatókkal együttműködve most először sikerült nyomon követni és megfigyelni műholdas adatok alapján ennek a gyorsítás szempontjából nélkülözhetetlen ioncsoportnak a keletkezési mechanizmusát. Ez az eredmény alapvető fontosságú a lökéshullámok tulajdonságainak megértése szempontjából és alkalmazható olyan távoli megfigyelések folyamatainak a magyarázatára, amelyek elérhetetlenek közvetlen műszeres mérésekkel (pl. szupernóva robbanások folyamatai).

Geomágnesség, elektromágneses geofizikai szerkezetkutatás

Általános ionoszférikus forrás-áramterekre meghatározták a felszíni impedanciát, azaz a tellurikus és a totális mágneses tér viszonyát a forrás geometriai sajátosságait leíró paraméterek a kiterjedés, valamint az áram irányú forráshullámhossz függvényében. Numerikus számításokkal meghatározták az impedanciát rögzített felszín alatti fajlagos elektromos ellenállás-eloszlás mellett. A geofizikai obszervatórium közegmodellje alapján megállapították, hogy nagy forráshullámhossz (kvázi-síkhullám) esetén az impedancia abszolút értéke a forrás kiterjedésétől gyakorlatilag független. A forrás hullámhosszának csökkenésével mind az amplitúdók aránya, mind az impedancia fázisa monoton csökken. Megállapították, hogy kis forráshullámhosszak esetén a forrás kiterjedése a térváltozások amplitúdójának arányát erősen befolyásolja.

Elkészítették az európai litoszféralemez geoelektromos modelljét (EURHOM). A kvázi-háromdimenziós modell különféle méretű cellákból épül fel, a cellákon belül pedig ún.

egydimenziós struktúrát feltételez. A modell egyrészt egy nagyléptékű képet ad a litoszféralemez mélyszerkezetéről és asztenoszféra mélységéről, másrészt lehetőséget ad a geomágneses indukció révén a felszínen fellépő elektromos tér numerikus számításához.

Matematikai geodéziai

A geodéziában alapvető fontosságú 2D és 3D hasonlósági transzformációk nemlineáris feladatának megoldására megadtak egy új levezetést. A forgatási mátrix parametrizálásán alapuló módszer nem iteratív és nem követeli meg a megfigyelési egyenletek linearizálását. A méretarány paraméterének meghatározását mind a 2D, mind a 3D hasonlósági transzformáció esetében másodfokú polinom-egyenletre vezették vissza, ellentétben a szakirodalomban ismert, instabilan megoldható negyedfokú egyenlettel. Megmutatták, hogy a méretarány tényező meghatározása után a feladat lineárisra redukálható, és megadták a lineárisra visszavezetett probléma kiegyenlítő számítási modelljét. A szakirodalomban eddig tárgyalt algoritmusokkal szemben, az általuk kidolgozott modellben tetszőlegesen sok egyenletből álló rendszer is kezelhető.

A totális legkisebb négyzetek módszerével megadták a kiegyenlítő egyenes egzakt levezetését, a bizonyításhoz a hagyományos legkisebb négyzetek módszereit használták fel. Igazolták, hogy a lineáris regresszió esetében a Gauss-Helmert modell szigorú kiegyenlítési eljárása és a totális legkisebb négyzetek módszere azonos eredményre vezetnek.

Általánosították a fotogrammetriai külső tájékozás paramétereinek meghatározására kidolgozott modellt. A feladat megoldására kidolgozott eljárás nem igényel sem Taylor-sorfejtést, sem közelítő értékeket, sem iterációt.

A nagyméretű hálózatokban létrehozható maximális kereszteződésmentes út-kötegek és minimális blokkoló csúcshalmazok meghatározására kidolgozott algoritmust továbbfejlesztettek, és kiegészítették a gráfelméleti Menger-tétel bizonyításával.

Matematikai modellezés

Megkezdték az MTA Széchenyi István Geofizikai Observatórium mindegy 50 évnyi archív, analóg tellurikus regisztrátumainak digitalizálását. A saját fejlesztésű program lehetővé teszi a regisztrátumok automatikus kiértékelést, újrafeldolgozását.

Automatikus eljárást fejlesztettek ki a Schumann-rezonancia idősorokból különféle időintervallumra vetített tranzienseloszlások számítására. Az így közel valós időben meghatározott tranzienseloszlások bekerülhetnek a Geofizikai Observatórium által folyamatosan közzétett származtatott adatok közé, bővítve ezzel annak adatszolgáltató-képességét és a további kutatások során feldolgozható adatok körét.

Az 1D magnetotellurikus inverziós programot továbbfejlesztették nem síkhullámú gerjesztés esetére. Ezzel az ionoszférában létrejövő árameloszlás térfrekvenciája is figyelembe vehető. Az inverziós eljárás így a felszín alatti térrész paramétereinek mellett a primer források térfrekvenciáját is meghatározza.

Szeizmikus refrakciós mérésre direktfeladat megoldó algoritmust fejlesztettek ki, melyben a közeg rétegezett; a rétegvastagságok a szelvény mentén, a sebesség egy rétegen belül változhat. A sugárút ebben az esetben a rétegen belül nem egy egyenes, hanem egy közöséges differenciálegyenlet megoldásával meghatározható görbe vonal.

b) Tudomány és a társadalom

A geodéziai, geofizikai kutatásoknak természetükből adódóan jelentős társadalmi-gazdasági hatása van. A kutatások fontos szerepet játszanak földtani, földfizikai katasztrófák

megelőzésében és elemzésében, a Nap-Föld fizikai jelenségek, naptevékenység földi hatásainak vizsgálatában, természeti erőforrások felkutatásában, környezetterhelés meghatározásában, globális változások okainak és helyi hatásainak feltárásában.

Az űrtechnológiáknak, korszerű információs technológiáknak és az integrált energiaellátó rendszereknek való „kítettségnk” az elmúlt évtizedekben olyan mértékűvé vált, hogy korábban elhanyagolható természeti kockázati tényezők, pl. napviharok hatása egyre inkább a hazai és nemzetközi érdeklődés előterébe kerültek.

Nagy napkitöréseket követő geomágneses viharok komoly zavart okozhatnak a kommunikációs rendszerekben és vezetékes energiaátviteli rendszerekben. A geomágneses indukció az elektromos hálózatokban kontinentális méretű áramkimaradáshoz is vezethet.

A mágneses viharok hatásainak elemzését szolgálja az európai litoszféralemez elektromos vezetőképességének modellje, az EURHOM. A mágneses viharok során fellépő zavarokért ugyanis közvetlenül a litoszférában keletkező földi áramok a felelősek.

A pontos, gyors, megbízható szeizmológiai adatszolgáltatás hozzájárul a pánikhelyzetek elkerüléséhez, esetleges katasztrófák esetén az eredményes katasztrófa elhárításhoz, az okozott károk súlyosságának csökkentéséhez.

A lakosság részéről történő, ún. makroszeizmikus adatszolgáltatás – földrengések helyi hatásainak megbízható ismerete – fontos bemeneti elemet jelent a földrengés-veszélyeztetettség meghatározásához, ami eredményesebb kockázat-elemzésekhez vezet és bizonyos földrengés-biztonsági óvintézkedésekhez járul hozzá.

A geoelektromos kutatások a felszín közeli térrész leképezésére szolgálnak. A különböző egyenáramú módszerek összehasonlító vizsgálata és a felbontóképesség optimalizálása kiterjeszti a geoelektromos kutatások műszaki és környezet-geofizikai alkalmazásának lehetőségét, akár beépített környezetben is repedések, üregek, szennyező idegen anyagok kimutatására.

A hazánkban leggyakrabban előforduló földtani katasztrófát a földcsuszamlások jelentik. Ezek közül is a Duna-menti magaspartok jelentik a legnagyobb veszélyt, a rájuk települt ipari létesítményekre, lakó és nyaraló településekre, valamint a közelben lévő köz-, és vasút vonalakra, továbbá a Duna hajózhatóságára. A kutatások eredményei jelentősen hozzájárulhatnak az okozott károk csökkentéséhez.

A partfalmozgások módszertani megfigyelésére mérési hálózatot alakítottak ki Dunaszekcső területén. A mozgások folyamatos monitoringozása mellett beszámolnak az eredményeikről és a várható eseményekről (az új törési zóna helyét is előre jelezték), amelyeket az önkormányzaton keresztül az illetékes katasztrófa védelmi szolgálathoz és a bányakapitánysághoz is eljuttatnak.

A Kárpát-medence mélyszerkezetének gravitációs kutatása és elektromágneses mélyszondázása a mélybeli ásványi nyersanyagok és potenciális energiaforrások előkutatási fázisának is tekinthetők.

A 3D Helmert-transzformációra levezetett megoldás és az ionoszféra szondázáson alapuló GNSS korrekciók javítása új távlatokat nyithat a műholdas helymeghatározás műszaki alkalmazásaiban.

A kvarter témakörében zajló kutatások a múlt klíma- és környezetváltozásainak jobb megértéséhez vezetnek és sok esetben validáló adatokat szolgáltatnak különböző klímamodellek értékeléséhez. Ez a közeljövő környezeti változásainak pontosabb megértését is eredményezi.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Massachusetts Institute of Technology: aeronómia, Schumann-rezonancia kutatása;
Ilmatieteen Laitos: geomágneses indukció, magnetotellurikus mélyszondázások;
Natural Environment Research Council: archív obszervatóriumi adatok feldolgozása;
Neurospace: EURISGIC FP7;
Institutet för Rymdfysik: Föld plazmakörnyezetének kutatása;
Polar Geophysical Institute of the Kola Scientific Center of Russian Academy of Sciences: geomágnesesen indukált áramok vezetékes rendszerekben;
The Catholic University of America: napszél magnetoszféra energiacsatolás;
Cseh Tudományos Akadémia Geonikai Intézet (Ostrava): a földrengés veszélyeztetettség meghatározási eljárások továbbfejlesztése;
Indian Institute of Technology, Kharagpur, India: null elrendezések inverziója;
Max Planck Intézet, Katlenburg-Lindau, Németország, Ben Gurion University, Izrael: „bow shock” folyamatok vizsgálata, úrplazma-fizika;
Magyar-francia bilaterális együttműködés: MTA CSFK GGI - Centre d'études des Environnements Terrestre et Planétaires, CETP/IPSL/CNRS: ionoszférikus forrástér vizsgálatok;
részvétel a Thunderstorm effects on the Earth-Ionosphere System (TEA-IS) European Science Foundation Research Networking Program-ban;
INTERMAGNET nemzetközi geomágneses obszervatóriumi hálózat.

Külföldről érkezett vendégkutatók:

Kutatási együttműködés keretében 6 fő vendégkutató 2 hónapot töltött az intézetben.

Intézeti kutatók hosszabb idejű külföldi szakmai munkája:

Posztdoktori ösztöndíjas: 1 fő;

Kutatási együttműködés keretében 16 fő intézeti kutató összesen 13 hónapot töltött külföldön.

A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység (eseti):

Habilitációs Bizottság, PhD védés 5 (1 elnök); OTDK – zsűritag, bíráló.

Nemzetközi tudományos rendezvény szervezése

Autumn Seminar on Geodesy for PhD Students, 12 October 2012 Sopron;

Joint INTIMATE - CELL-50k meeting, Budapest;

Ifjú Szakemberek Ankétja, Tatabánya, 30-31. March, 2012;

EURISGIC First Progress Meeting and Executive Board Meeting.

Hazai tudományos rendezvény szervezése

Geomatika Szeminárium, Sopron, 2012.11.08-09;

MTA FKT 2011. évi beszámolója;

Kövesligethy Radó Emlékülés és névadó (2012. október 17. MTA és Szeizmológiai Obszervatórium);

Soproni Tudós Társaság 2011. évi közgyűlése;

Kántás Károly megemlékezés, Sopron 2012. december 1.

Földi Elektromágnesség- közgyűlési előadórés, MTA 2012. május.

A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység (rendszeres):

ELTE TTK: 2 elméleti kurzus, 1 gyakorlati kurzus;

NyME KTK: 11 elméleti, 1 gyakorlati kurzus;

NyME FMK: 3 elméleti, 2 gyakorlati kurzus;

NyME EMK: 9 elméleti, 4 gyakorlati kurzus.

Külföldi egyetemen végzett oktatási tevékenység

BBTE, Kolozsvár: 1 elméleti kurzus, 1 gyakorlati kurzus.

Doktori iskolában törzstag:

NyME EMK Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola: 2 fő;

NyME FMK Cziráki József Faanyagtudomány és Technológiák Doktori Iskola: 1 fő;

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

Doktori iskolában oktatás:

NYME Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola: A Föld szerkezete és folyamatai, Digitális képfeldolgozás, Geodinamikai folyamatok modellezése, GNSS rendszerek környezettudományi alkalmazása, Geomágnesség, Űridőjárás és klíma;

NyME Cziráki József Faanyagtudomány és Technológiák Doktori Iskola: Méréselmélet;

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

BME Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola: Földmodellek geofizikai alapjai.

Témavezetés (TDK-dolgozat):

Bécsi Közgazdasági Egyetem: 1 fő;

ELTE TTK Geofizikai és Űrtudományi Tanszék Földtudományi alapszak: 1 fő.

Témavezetés (BA, BSc diploma):

ELTE TTK Geofizikai és Űrtudományi Tanszék, Földtudományi alapszak: 3 fő;

NYME régészeti kutatás geoelektromos módszerrel: 1 fő.

Témavezetés (MA, MSc diploma):

ELTE TTK Geofizikai és Űrtudományi Tanszék, Geofizikus: 1 fő;

ELTE TTK környezetkutató szak: 1 fő;

ELTE TTK meteorológus: 1 fő;

NYME informatika: 1 fő;

BBTE geológus: 2 fő.

Témavezetés (PhD disszertáció):

ELTE TTK Földtudományi Doktori Program: 1 fő;

NYME (EMK, KTK, FMK): 7 fő.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

TAMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0015 *“Föld-rendszer adatok tudományos feldolgozása és az ismeretek társadalmassítása korszerű informatikai eszközök segítségével”* 2012–2015 6.400 E Ft dologi és személyi ktg. a CSFK költségvetésében, továbbá 18.000 E Ft beruházás a konzorciumvezető NYME költségvetésében a SZIGO és a KRSZO fejlesztésére;

OTKA K105399 *Budapest földrengés-veszélyeztetettség és mikrozonációja*, 2013–2016, 11.000 E Ft;

Számítógéppont fejlesztése, NIIFI, 2012, 600 E Ft;

Near Surface geophysical tomography and profiling, MTA „Nagy infrastruktúra”;

TIOP-1.3.1-07/2-2F-2009–0008 *Geofizikai kutatólaboratóriumi eszközök az NYME „Zöld Egyetem”-program megvalósításához* NYME GGI-be kihelyezett Földtudományi tanszék, 29.600 E Ft (egy korábban elnyert, 2012-ben megújított és realizálódott pályázat).

Szerződéses vállalati kapcsolatok

Paksi Atomerőmű: A nemzeti szeizmológiai hálózat fejlesztése: 2 szélessávú szeizmométer beszerzése.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Süle B, Wéber Z: Earthquake source parameters and scaling relationships in Hungary (central Pannonian basin). *Journal of Seismology*, DOI 10.1007/s10950-012-9334-3, (2012)
2. Varga P, Krumm F, Doglioni C, Süle B, Wang K, Panza GF: Global pattern of earthquakes and seismic energy distributions: insights for the mechanisms of plate tectonics. *Tectonophysics*, 530-531:(1) 80-86 (2012)
3. Mentés Gy: Observation of local tectonic movements by a quartz-tube extensometer in the Sopronbánfalva Geodynamic Observatory, in Hungary - Validation of extensometric data by tidal analysis and simultaneous radon concentration measurements. *Journal of Geodynamics*, 58: 38-43 (2012)
4. Papp G, Szűcs E, Battha L: Preliminary analysis of the connection between ocean dynamics and the noise of gravity tide observed at the Sopronbánfalva Geodynamical Observatory, Hungary. *Journal of Geodynamics*, 61: 47-56 (2012)
5. Ádám A, Prácer E, Wetztergom V: Estimation of the electric resistivity distribution (EURHOM) in the European lithosphere in the frame of the EURISGIC WP2 project. *Acta Geod. Geoph. Hung.*, 47(4): 377-387 (2012)
6. Williams E, Kuo C-L, Bór J, Sátori G, Newsome R, Adachi T et al.(8): Resolution of the sprite polarity paradox: The role of halos. *Radio Science*, 47:(2) Paper RS2002. (2012)
7. Újvári G, Varga A, Ramos F C, Kovács J, Németh T, Stevens T: Evaluating the use of clay mineralogy, Sr-Nd isotopes and zircon U-Pb ages in tracking dust provenance: An example from loess of the Carpathian Basin. *Chemical Geology*, 304-305: 83-96 (2012)
8. Závoti J: A simple proof of the solutions of the Helmert- and the overdetermined nonlinear 7-parameter datum transformation. *Acta Geod. Geoph. Hung.*, 47(4): 453-464 (2012)
9. Bányai L: Some remarks on linear least-squares fits with errors in both coordinates. *Acta Geod. Geoph. Hung.*, 47(4): 441-452 (2012)
10. Prattes G, Schwingenschuh K, Eichelberger HU, Magnes W, Boudjada M, Stachel M, Vellante M, Villante U, Wetztergom V: Reply to Masci's comment on "Ultra Low Frequency (ULF) European multi station magnetic field analysis before and during the 2009 earthquake at L'Aquila regarding regional geotechnical information" by Prattes et al. (2011) *Natural Hazards and Earth System Science*, (ISSN: 1561-8633) 12: (5) 1721-1722 (2012)

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 15-17.

telefon: (1) 391 9322; fax: (1) 275 4668

e-mail: abraham.peter@csfk.mta.hu; honlap: www.konkoly.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A beszámolási időszakban az intézet az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont alapító okiratában a Csillagászati Intézet számára rögzített feladatoknak megfelelően alapkutatót végzett, több egyetemen részt vett a felsőfokú oktatással kapcsolatos feladatok ellátásában, valamint jelentős aktivitást fejtett ki a tudományos eredmények disszeminációjában. 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 csillagokat és a Napot övező tér kutatása

Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája

Exobolygórendszerek

A Naprendszer égitestjei

Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások

Laboratóriumi asztrofizika

Gamma-kitörések

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

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A csillagok belső szerkezete és pulzációja

Részletesen analizálták a névadó RR Lyrae csillag Kepler-űrtávcsővel gyűjtött adatait. A rövid mintavételezésű (short cadence) mérések segítségével megmutatták, hogy három radiális módus is jelen van a csillagban: az alpmódus mellett az első és a kilencedik felhang is megjelenik, igen kis amplitúdóval. Szintén megmutatták, hogy a csillagban a periódus-kettőződés jelensége folyamatosan jelen van, de változásokon megy át. A nagyobb és kisebb amplitúdójú ciklusok sorrendje néhány hetes, a modulációnál gyorsabb időskálán felcserélődik. Több szakaszt is azonosítottak, ahol átmenetileg nem két, hanem hat eltérő amplitúdójú ciklus mintázata ismerhető fel. Hidrodinamikai modellekkel való összevetés alapján ilyenkor az alpmódus és az első felhang megközelíti a 3:4-es rezonanciát.

Az empirikus eredményekhez szorosan kötődve elsőként azonosítottak három radiális módot is tartalmazó, RR Lyrae hidrodinamikai modelleket. Ezekben az alpmódus mellett az első és

a kilencedik felhang van jelen, a Kepler megfigyelésekhez hasonlóan igen kis amplitúdóval. Az első felhang destabilizációját a klasszikus RRab (alaplómódusú) régióban a perióduskettőződés jelenléte okozza. A három módus együtt igen változatos dinamikai állapotokat hozhat létre: számtalan különböző rezonáns, illetve kaotikus állapotot azonosítottak. A többmódusú, nemlineáris modellek segítségével nemlineáris asztroszeizmológiai vizsgálatokra is lehetőség nyílik: a rezonanciák, frekvenciaeltolódások és módusamplitúdók is összehasonlíthatóak az észlelési adatokkal. Elsőként az RR Lyrae csillag észleléseinél alkalmazták ezeket a modelleket.

Megmutatták, hogy a Kepler által megfigyelt KIC 4840675 három csillagból áll: egy gyorsan forgó A színtípusú csillagból és két halványabb, Nap típusú kísérőből. Az A csillag delta Scuti változó egy domináns és sok kisamplitúdójú módussal, valamint több, kisfrekvenciás változással. A legnagyobb amplitúdójú kisfrekvenciás jel a csillag forgásával azonosítható. Azonban a rendszer legérdekesebb aspektusa három független frekvencia az 1,4-1,5 mHz frekvenciatartományban, ami messze a kívül esik a delta Scuti csillagok tipikus frekvenciaintervallumán. Három lehetséges magyarázatot adtak a rejtélyes frekvenciák eredetére: (1) szoláris oszcillációk, (2) a roAp csillag oszcillációja, (3) egy láthatatlan, kompakt pulzáló kísérő, de a kérdés csak további megfigyelések révén dönthető el.

Megvizsgálták a Kepler-űrtávcső által megfigyelt V1154 Cygni csillagot, amely eddig az egyetlen biztos azonosítású cefeida a Kepler látómezejében. A közel 600 napos adatsor analízisével kimutatták, hogy a pulzációs periódus ciklusról ciklusra szignifikáns mértékű változásokat mutat, ami a fénygörbe alakjának apró változásaival is összefüggésben áll. Ez alapján a cefeidák nem annyira pontos „kozmosz órák“, mint korábban gondolták: az egyedi ciklushosszak egymástutánja 0.015-0.020 nap szórást mutat az adatsor bármely szegmensében. Szimulált adatsorokkal kimutatták, hogy ha ilyen mértékű periódus-instabilitások általában jellemzőek a cefeidákra, az jelentősen megnehezíti a kisebb tömegű kísérők, pl. bolygók kimutatását a fényidő-effektus segítségével, mert a keresett jel könnyen elveszhet a csillag periódus-instabilitásának zajában.

A Blazhko-effektus, az RR Lyrae csillagok pulzációjának modulációja, a csillagpulzáció problémájának egyik hírhedt, régóta megoldatlan problémája. Egy lehetséges újabb magyarázat szerint a modulációt a csillag konvektív zónájának periodikus változásai okozzák. Ezt a lehetőséget vizsgálták meg a Florida-Budapest kóddal és az amplitúdó-egyenletek vizsgálatával. Azt találták, hogy a modell csak 100 napnál hosszabb periódusú modulációt képes megmagyarázni, mert a pulzáció a csillag szerkezetének változását a feltételezettnél lassabban követi le. A vizsgálatok alapján a konvektív régió változásai önmagukban nem képesek megmagyarázni a Blazhko-effektust.

A rendelkezésre álló 120 éves fotometriai megfigyeléseket felhasználva vizsgálták az M3 gömbhalmaz 134 db RR Lyrae csillagának periódusváltozásait. A legszabályosabb periódusváltozást mutató változócsillag-minta átlagos periódusváltozási üteme jó egyezést mutat a csillagfejlődési modellekből származtatott értékekkel. Ugyanakkor a csillagok nagy hányada mutat a fejlődési modelleknek ellentmondó periódusváltozásokat. A változók közel 50 százalékának nem stabil a fénygörbéje, Blazhko-moduláció figyelhető meg bennük. A különlegesen viselkedő (fénygörbe-modulált és/vagy szabálytalan periódusváltozású) csillagok nagy aránya arra utalhat, hogy a látszólag szabályos periódusváltozású változók között további, fénygörbéjében és/vagy periódusában instabil csillagok lehetnek, mivel a kérdés eldöntésére nem állnak rendelkezésre eléggé hosszú megfigyelések. Ezen változók jelenléte magyarázhatja az evolúciós várakozásokkal nem összeegyeztethető, de szabályos periódusváltozásokat.

Elvégezték az XY And és UZ Vir Blazhko-modulált csillagok fénygörbéjének analízisét. A két változó fénygörbéje a szokásos modulációs szerkezetet mutatja a Fourier-spektrumban, multiplettekkel a pulzációs csúcsok körül. Mindkét esetben egy további, független frekvenciát és a pulzációval alkotott lineárkombinációit is kimutattak. Részletesen megvizsgálták a triplettszerkezetek amplitúdó- és fázisviszonyait. Az epochafüggetlen fáziskülönbségek a legtöbb esetben szisztematikus színtünetet mutatnak, ugyanakkor ez az összefüggés fordított a két csillag esetében. Az általuk korábban kidolgozott Inverz Fotometriai Módszert alkalmazva meghatározták a csillagok fizikai paramétereit és változásukat a Blazhko-moduláció alatt. Eredményeik ellentmondanak a Blazhko-effektus Stothers-féle modelljének.

Befejezték a tejútrendszerbeli klasszikus cefeidák kémiai összetétele és a fénygörbéjük Fourier-paramétereirei közötti összefüggések feltárását. Az összefüggések széles hullámhossztartományban megegyeznek, így használhatók a Gaia űrtávcső által használt fotometriai sávokban is. Módszerük segítségével a spektroszkópiai mérésekhez képest sokkal halványabb csillagokra is meghatározható a csillag fényessége. Ezt az összefüggést használva tovább pontosítható a cefeidák periódus-fényesség relációja, és az erre alapozott valamennyi távolságmeghatározási módszer.

Az Európai Déli Obszervatóriumban végzett polarimetriai mérésekből meghatározták az RS Puppis (az eddigi legpontosabban ismert távolságú, hosszú periódusú galaktikus cefeida) körüli burok tömegét és annak szerkezetét. A gáz és a por együttes tömege 290 naptömegnek adódott, ami kizárja, hogy a burok a cefeida által levetett anyag legyen.

Befejezték a HR 8752 sárga hiperóriás hosszú időskálájú változásainak vizsgálatát. A spektroszkópiai és fotometriai megfigyelések alapján – melyek közül a fényességbecslések a 19. század közepéig nyúlnak vissza – úgy találták, hogy a csillag effektív hőmérséklete jelentősen megnőtt az elmúlt 25 évben. Ez gyors kék felé történő elmozdulásra utal a Hertzsprung-Russell-diagramon. A HR 8752 az ún. „sárga evolúciós űr”-ben található, melyről megállapították, hogy két instabil régiója van, és a csillag az alacsonyabb hőmérsékletűből a magasabb felé tart. A hosszú időskálájú változásokat a Meader-féle gejmódszer segítségével értelmezték.

Aktív jelenségek csillagokon

Három aktív csillag, a V2253 Oph, az IT Com és az IS Vir hosszú időt átfogó fotometriai méréseit elemezték. A három csillag egyvonalas szoros kettős K óriás főkomponensei a pályasíkjuk és rotációs szinkronizáció különböző állapotaiban találhatóak. Földi és űrtávcsöves adatokat kombinálva megmutatták, hogy a V2253 Oph és IT Com esetében a spektrális energiaeloszlás megfelel az egyszerű fotoszférikus sugárzásnak. Ezzel szemben az IS Vir rendszerében marginális közepes infravörös többletet találtak, ami porkorong jelenlétére utalhat. Meghatározták a három rendszer főkomponensének forgási periódusait, melyek a 20-60 napos tartományba esnek. Az adatokból differenciális rotáció, valamint aktivitási ciklikusság is kimutatható volt. Az IT Com ún. flip-flop jelenséget mutatott 2-3 év alatt. A domináns aktív hosszúság felcserélődése a periasztron-átmenethez időben közel történt, ami a pálya dinamikájának a mágneses aktivitásra való hatását jelentheti. A V2253 Oph 21,55 napos rotációs periódusa 15-ször hosszabb pályaperiódussal is fáziskohereciát mutat, ami szintén jele annak, hogy a pálya árapályereje hatással van a csillag mágneses aktivitására.

Több mint három évtizedes fotometriai mérést felhasználva vizsgálták két gyorsan forgó csillag, az EI Eri (G5IV) és a V711 Tau (K1IV) aktivitási jelenségeit. Az évi átlagos rotációs periódusokból azt találták, hogy az EI Eri jól meghatározható Nap típusú differenciális rotációt mutat, a foltok az egyenlítőtől a magas szélességeig egyaránt megtalálhatók. A V711 Tau differenciális rotációja ellentmondásos értékeket mutat, de mindenképpen csekély

mértékű. A V711 Tau K1IV komponensének foltjait az árapályerők stabilan egy helyen tartják. A két rendszer fizikai paraméterei hasonlóak, csak egy dologban különböznek: az EI Eri másodkomponense egy kistömegű M4-5 törpecsillag, míg a V711 Tau párja egy G5V csillag, így a két rendszer tömegközéppontja nagyon különböző pozícióban van a rendszereken belül. Ez a helyzet kihathat az aktív csillagok teljes belső szerkezetére, és ezúton komoly különbségeket is okozhat a csillagfelszíni aktivitási jelenségek megjelenésében.

Az RS CVn típusú kettősrendszer zéta Andromedae K-óriás komponensének differenciális rotációját is kutatták. A felszíni folteloszlások Doppler-rekonstrukcióját elvégezték idősorban három spektroszkópiai adatállományra, amelyek egymástól függetlenül három különböző megfigyelési helyről származnak. Az egyes vonalakra elkészített Doppler-képek jó egyezéssel mutatják a folteloszlást, számos alacsony szélességen található foltot találtak kb. 1000 K hőmérsékleti kontraszttal, valamint egy aszimmetrikus elhelyezkedésű poláris sapkát, amelynek kiterjedése az idő múlásával csökkent. A felszín differenciális rotációját az időben egymást követő képpárok keresztkorrelációjából határozták meg. A keresztkorrelációs vizsgálat Nap típusú differenciális rotációt tárt fel.

Napaktivitás

2008. január 2-18. között két aktív vidék volt a Nap egyenlítője közelében, amelyekben a Hinode/EIS spektrográffal gyors koronaplazma-kiáramlásokat figyeltek meg. A vizsgált kérdés, amire választ kerestek: az aktív vidékből kiáramló plazma kijut-e a bolygóközi térbe, vagyis tekinthető-e a lassú napszél nyalábforrásának? Mágneses modellezést alkalmazva kimutatták, hogy a plazmaáramlások a mágneses topológia kvázi-szeparatrix rétegei közeléből indulnak ki, ami arra utal, hogy mágneses átkötődés hajtja az áramlásokat. Ezzel megerősítették egy korábbi vizsgálatuk eredményét. A modell azt is mutatta, hogy bizonyos plazmaáramlások zárt mágneses erővonalak mentén történnek, míg mások nagyléptékű erővonalak mentén elhagyták az extrapolációs „dobozt”. Globális (az egész Napra vonatkozó) mágneses modell jelezte, hogy ezek az erővonalak egy mágneses nullponthoz tartoznak és elérik a napszél ún. forrás-felszínét, amely a Nap központjától 2,5 napsugárnyi távolságra van, tehát a plazmaáramlások ezen erővonalak mentén a napszélbe folyhatnak. A két különböző korú aktív vidékhez köthető lassú napszélnyalábok különböztek hőmérsékletükben, sebességben és kémiai összetételben, amit szintén a mágneses szerkezettel és az aktív vidékek korkülönbségével magyaráztak. Ezzel a vizsgálattal úttörő módon kimutatták, hogy az aktív vidékből kiinduló bizonyos plazmaáramlások valóban a lassú napszél forrásai.

A napfoltaktivitás hosszúságbeli eloszlásának időbeli változását vizsgálva az aktív zónák jellegzetes migrációját azonosították. Ez a vándorlás az idő-hosszúság diagramon parabolák sorozatát rajzolja ki, melyek a Spörer-diagram hosszúságbeli megfelelőjének tekinthetők. A diagram nem mutat ciklusfüggést. A migrációs útvonal mentén haladva meghatározható az aktív zóna szélessége, mely az aktivitási maximum idején szélesebb, egyébként kb. 20-30 fok és detektálható a flip-flop jelenség.

Az SDD napfoltkatalógus, a SOHO/MDI észleléseire épülő legrészletesebb adatbázis adataira támaszkodva egy új fler-előrejelzési eljárás kidolgozását kezdték el. A módszer az eddigi megközelítésektől eltérően a horizontális mágneses tér gradiensének a napfoltok mozgása és fejlődése révén előidézett változásait követi.

Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája

A V2492 Cygni jelű fiatal csillag 2010-ben kitörést produkált. Az intézeti infravörös csoport tíz hullámhosszon monitorozta a kitörést, részben földi telepítésű távcsövekkel, részben infravörös űrteleszkópokkal. Analizálták a fénygörbét és a szín-szín diagramokat,

összevetve a színváltozásokat a csillagközi vörösödési törvénnyel. Megvizsgálták a csillag tágabb környezetét is, hőmérséklet- és optikaimélység-térképeket készítve a távoli-infravörös adatokból. Azt találták, hogy a különböző hullámhosszon mért fénygörbék alakja nagyon hasonló, azt sugallva, hogy a fényváltozás egyetlen fizikai okra vezethető vissza, ami legnagyobb valószínűséggel változó extinkció. A valószínűsíthető magyarázat szerint a központi forrást egy, a belső diszkben keringő porfelhő időnként eltakarja, a távoli-infravörös fluxusok változatlansága pedig arra utal, hogy hosszabb ideig létező, és nem tranzienis porfelhőről lehet szó. A V2492 Cyg esete azt példázza, hogy egy fiatal eruptív csillag kitörése nem feltétlen írható teljes mértékben a megnövekedett akkréció számlájára. A megfigyelt változékonyság így információt szolgáltatott a belső korong szerkezetéről, ami segítheti a bolygóképződés kezdeti feltételeinek megértését.

587 H-alfa emissziós csillagot azonosítottak az Orion-köd halmazának központi régiójában. 121 csillagban sikerült első ízben kimutatni az emissziót, melyeket korábbi felmérések nem detektáltak. Rendszeresen végeztek távészleléseket a Hawaii-szigeteki 2,2 m-es teleszkóppal fiatal csillagokról.

Átépitették és rutinszerűen használták az OTKA-támogatással megépített kifelbontású spektrográfot a piszkéstetői 1 m-es távcsövön. Méréseket végeztek kistömegű fiatal csillagokról, melyek jellegzetes és időben változó emissziós vonalakat mutatnak. A színkép változásainak detektálásával nyomon követték a fiatal csillagokban működő tömegbefogási folyamatokat.

A gázban gazdag primordiális korongokat és a ritkásabb portartalmú, gázban szegény törmelékkorongokat általában a csillagkörüli anyag fejlődésében két jól elkülönülő fázisnak tekintik. Egy, az APEX rádióteleszkópot felhasználó nagyobb felmérés során a 30 millió éves HD 21997 jelű csillag törmelékkorongjában – milliméteres hullámhosszakon vizsgálódva – szénmonoxid gázt találtak. Ez az egyik legöregebb ismert gázos törmelékkorong, és a magas kor azt sugallja, hogy a benne felfedezett CO gáz másodlagos eredetű lehet, amely planetezimálok szublimációja, jeges porszemcsék fotodeszorpciója és a szemcsék ütközései során történő elpárolgása nyomán jöhet/jöhetett létre. Az ALMA interferométer ún. „Early Science” programjának keretében elsőként sikerült a HD 21997 körüli korongot felbontani szubmilliméteres hullámhosszakon. A térbelileg és spektrálisan is feloldott CO emisszió azt mutatja, hogy a molekuláris gáz egy korongban található, és rotációja kepleri a központi csillag körül. A mérések nagy mennyiségű szénmonoxid jelenlétére utalnak, míg az adatok elemzéséből származó első eredmények alapján a megfigyelt gáz inkább primordiális eredetű. Ez igen komoly kihívás a jelenlegi korongfejlődési elméletek számára, mivel azok szerint a primordiális gáznak már sokkal korábban el kellene tűnnie a rendszerből.

Exobolygórendszerek

A HATNet exobolygó-kereső program keretében felfedeztek tíz extraszoláris bolygót, melyek széles tömegintervallumot fognak át a Szaturnusztól a többszörös Jupiter-tömegig bezárólag. Néhányat érdemes részletesebben is megemlíteni az érdekesebb példák közül. A HAT-P-17 rendszerben egy excentrikus pályán mozgó forró Szaturnusz mellett egy külső pályán keringő hideg Jupitert találtak. A kettő közül csak a belső égitest halad át központi csillaga előtt, a külső létezésére Doppler-mérések utalnak. A HAT-P-34 rendszerben egy magányos bolygót találtak nagyon elnyúlt pályán, kb. háromszoros Jupiter-tömeggel. A felfedezés érdekessége, hogy a forró Jupiterekre a pálya az árapály-hatások miatt csillagászati léptéken gyorsan cirkularizálódik, így a nagy excentricitású keringést esetleg további perturbáló égitestek okozhatják. Felfedeztek egy forró Szaturnuszt (vagyis olyan extraszoláris bolygót, amelynek tömege 0,1 és 0,4 Jupiter-tömeg közé esik, keringési periódusa pedig nagyságrendileg 10

napnál rövidebb), aminek érdekességét az adja, hogy jelenleg még ritkának tekinthető égitesttípus - a mai ismert, 10 napnál rövidebb periódusú bolygók kevesebb mint 10%-a forró Szaturnusz.

Tanulmányozták a bolygókeletkezési folyamatoknak helyszínt adó protoplanetáris korongok belső folyamatait, különös tekintettel a bolygócsírák kialakulására a korongokban fellépő belső instabilitások hatására. Részletes modellszámításokat végeztek, majd összehasonlították a szimulációk eredményeit szubmilliméteres hullámhosszakon végzett megfigyelésekkel. Hidrodinamikai számításaik eredményét felhasználva háromdimenziós radiatívtranszfer-kód segítségével modellezték a porkorongok képét, s az eredmények alapján nagyléptékű anticiklonikus örvények létezésére következtettek. Mindezek alapján a szubmilliméteres képek jelenleg is működésben lévő bolygógyárakat tárnak szemünk elé.

Földfelszíni spektroszkópiával (Arizona és Texas, USA) három bolygórendszer új tagjainak felfedezéséhez járultak hozzá: egy rezonáns második óriásbolygó a HD 204313 körül, több óriásbolygó a HD 155358 rendszerében, illetve a Qatar-2 rendszerében két bolygó kimutatása. Utóbbi azért érdekes, mert egy alig 1,34 napos pályán keringő forró Jupiter rendszerében mutatták ki egy távolabbi bolygó létezését, ami gyengíti a Kepler-úrtávcső forró Jupiterrek magányosságára vonatkozó statisztikai eredményeit.

A KOI-13.01 jelzésű szubsztelláris kísérő égitest pályadőltségét az intézet munkatársai mutatták ki először a Kepler-úrtávcső ultraprecíz fotometriai adatai alapján. A mérést a gyorsan forgó központi csillag felületi fényességének nem egyenletes eloszlása tette lehetővé. Újabb vizsgálatokkal kimutatták az időközben forró Jupiternek bizonyult exobolygóról, hogy a központi csillag és a bolygó 5:3 arányú spin-pálya rezonanciában található, ami első bizonyíték arra, hogy elegendően nagy tömegű és szoros pályán keringő bolygók képesek akár a csillaguk forgását is befolyásolni gravitációs perturbációikkal.

Folytatták vizsgálataikat az exobolygók körül keringő kísérők kimutatása és jellemzése témakörében. Legújabb kutatásukban azt járták körbe, hogy hogyan mutatható ki egy exohold létezése az exobolygó-tranzitgörbék lokális szórásának finom elemzéséből. Megmutatták, hogy az adatok kezelése során az exohold-jelek megőrzése érdekében vigyázni kell a szisztematikus trendek levonásakor.

Naprendszer égitestjei

Az általuk vezetett „TNOs are Cool!” programban a Herschel-úrtávcsővel észlelt mintára meghatározták a szórt korong, a klasszikus és a plutino osztályokba tartozó Kuiper-övi objektumok fizikai tulajdonságait. A másik két objektumcsoporttól eltérően a szórtkorong- és „lecsatolódot” objektumok korrelációt mutatnak a méret és az albedo között, vagyis nagyobb égitestekhez nagyobb albedo is tartozik, ami arra utal, hogy a nagyobb objektumok felszínét nagyobb arányban borítja „friss” jég. A klasszikus és plutino populációkra kapott méreteloszlások a korábban feltételezettnél „laposabb” eloszlást mutatnak, azaz a nagy égitestek számához képest kevesebb kisebb égitestet látunk, mint azt korábban gondolták. Ez megmagyarázhatja azt is, hogy a kisebb objektumokat kereső (pl. nagyszámú csillagfedést megfigyelő) programok miért nem látnak a jósoltnak megfelelő számú eseményt.

Szintén a Herschel mérései alapján meghatározták két különleges objektum, a Sedna és a 2010 EK139 alapvető fizikai tulajdonságait. A két objektum tulajdonságai összhangban vannak a korábban a szórtkorong-objektumokra kapott összefüggéssel, vagyis hogy a nagyobb objektumokhoz magasabb albedo tartozik, és az albedo értékek ezekre az égitestekre szisztematikusán nagyobbak, az átmérők pedig kisebbek a korábban feltételezettekénél.

A Herschel-úrtávcsővel és a chilei ESO/MPG 2,2 m-es távcsővel végzett megfigyelések alapján meghatározták a 2012 DR30 nevű, különlegesen elnyúlt és nagy inklinációjú pályán

keringő égitest méretét és alapvető felszíni tulajdonságait. Az égitest legfontosabb különlegessége, hogy a valószínűsíthető Oort-felhőbeli eredete ellenére a V-típusú (fővbeli) aszteroidákhoz hasonló visszavertfény-spektrumot mutat, amit eddig soha nem észleltek Kentaurok és egyéb Kuiper-övi objektumok között.

ESO VLT, Hubble- és Herschel-mérések kombinálásával kimutatták, hogy a Hale-Bopp-üstökös aktivitásának végén dérképződéshez hasonló folyamat zajlott az üstökösmaagon, amely egyedi megfigyelés, és a mag különösen nagy tömegével magyarázható.

A 13,5 éves keringési idejű 8P/Tuttle-üstökös magját közvetlenül megfigyelték a Hubble- és a Spitzer-űrtávcsövekkel. A mérések időbeli hossza lefedte az üstökösmaag tengelykörüli forgási idejét, aminek általuk kimért értéke igazolja az areciboi radarmérések eredményeit. A látható fényben és a termális infravörösben felvett fluxusgörbék a mag összetett alakjára utalnak, amire a legmegfelelőbb egy érintkező testekből álló kettős mag modellje. Számításaik szerint a mag két komponensének rádiusza 2,56 km és 1,1 km. Azt is megmutatták, hogy a radarmérésekből kapott magmodell nem egyezik az űrtávcsöves eredményekkel, s az eltérés valószínűsíthető oka a két egyed nagyon eltérő fényvisszaverő képessége.

A Marson a Gale kráterben lévő Peace Vallis folyóvölgyre készült számítás alapján a vízfolyásnak mindössze néhány napig kellett aktívnak lennie, hogy a megfigyelt hordalékot lerakja. A számításaik alapján kapott időtartam feltűnően rövid, további elemzése szükséges. Az egykori marsi vizes környezetekben előforduló folyékony fázis időtartamáról és térfogatáról készült elemzés alapján mindkét paraméter szerint eltérő csoportokat alkot sok vizeskörnyezet-típus. Ugyanakkor átfedés mutatkozik a becsapódásos krátertavak, idős vízfolyásnyomok, és hidrotermális hőforrások között. Utóbbi lehet észlelési szelekció eredménye is, ennek vizsgálata folyamatban van.

Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások

Laboratóriumi asztrofizika. A Földtani és Geokémiai Intézettel együttműködésben elkezdtek a laboratóriumi asztrofizika kutatási és humán erőforrási bázisának kiépítését. Az akadémiai infrastruktúra-fejlesztési pályázaton elnyert támogatásból megkezdődött a laboratóriumi háttér kiépítése, miközben kiterjedt nemzetközi konzultációkat folytattak vezető európai intézményekkel (Grenoble, Heidelberg, Jéna).

Gammakitörések. Megvizsgálták, hogy a gammakitörések utófényének optikai fényessége milyen kapcsolatban áll a gamma- és a röntgentulajdonságokkal. Az analízis megmutatta, hogy az optikai fényesség függ a kitörés gammatartományban mért időtartamától, az ott kisugárzott energiától, valamint csúcsintenzitástól, de nincs rá hatással a röntgenfluxus, illetve a gamma-fotonindex. A gamma tartományban mért tulajdonságoknak az optikai fényességre gyakorolt hatása valószínűleg a központi hajtóműből kilövellt anyag energiájával függ össze, amely az utófényt kelti a környező csillagközi anyagban.

b) Tudomány és társadalom

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 kiemelve ebből a tevékenységből: a nagy sikerű hírek.csillagaszat.hu hírportál gondozása (főszerkesztőként, állandó és alkalmi szerzőkként), évente százas nagyságrendben ismeretterjesztő előadások tartása, riportok, interjúk adása a legkülönbözőbb sajtótermékeknek. Utóbbiakra az aktuális események, mint például a Kepler-

űrtávcső legújabb (esetenként magyar) felfedezései, a novemberi ausztráliai napfogyatkozás, vagy a Piszkés-tetőn felfedezett kisbolygók és szupernóvák adták az alkalmat. Az MTA Lendület programját is komoly sajtóérdeklődés kíséri, ami jelentősen kihatott az intézet ismertségére, különösen a második Lendület program, a Légyszem-kamera projektjének megindulása után. Az intézeti kutatásoknak a nagyközönséghez való közelebb vitelét szolgálják az évente kétszer megrendezett nyílt napok, de az is, hogy a Piszkéstetői Observatórium egész évben nyitva áll az érdeklődő csoportok előtt. A látogatások nemzetközi színvonalú lebonyolításához látogatócentrumok kialakítására lesz szükség mind Budapesten, mind Piszkés-tetőn. Ezek tervezése, az igények és lehetőségek felmérése folytatódott. 2012 nagy eredménye egy komoly konzorciális TÁMOP pályázat elnyerése a tudományos eredmények disszeminációja témakörben, amivel minőségi ugrás várható a diákokkal, egyetemistákkal, doktoranduszokkal, illetve a csillagászat iránt érdeklődő nagyközönséggel folytatott kapcsolattartásban. Folyamatosan tudatosítják a közvéleményben és a döntéshozókban a fényszennyezés gazdasági, környezeti, kulturális kártételeit. Esetenként speciális szaktudást igénylő szakértői feladatokat is vállalnak (pl. bírósági ügyekben).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai: A beszámolási időszakban rendkívül eredményes intézményi kapcsolatokat tartottak fent hazai csillagászati kutatóhelyekkel (Szegedi Tudományegyetem, Bajai Csillagvizsgáló, ELTE szombathelyi Gothard Asztrofizikai Observatóriuma), melyek közül különösen gyümölcsözőnek bizonyult az ELTE Gothard-Lendület kutatócsoport megalapítása év közepén.

Az intézet kutatói a beszámolási időszakban is részt vettek az egyetemi oktatásban és a 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, Observációs csillagászat: kettőscsillagászat Asztrostatisztika I-II, Planetológia, A napfizika aktuális kérdései, Galaktikus csillagászat, Fiatal csillagok fényváltozásai, Asztrofizika II., Asztrobiológia, Mars-kutatás, Csillagászati földrajz, A Naprendszer kis és mikroszkópikus égitestjei, Szeminárium a csillagkeletkezés és csillagközi anyag kutatásának legújabb eredményeiről, Elméleti asztrofizika I., Műszertechnika I., Bevezetés a csillagászatba III-IV., Rádiócsillagászat. DTE-n előadás: Zenei akusztika, SZTE-n előadás: Galaktikus csillagászat I., BKF-n előadás és gyakorlat: Probability theory, linear algebra, and Operation research; Calculus for Bussines and Economics – Calculus

Nemzetközi: A hosszabb ideje meglévő és folyamatosan gyümölcsöző nemzetközi együttműködések (CoRoT, Gaia, IRSES, KASC, Cesar projektek) túl 2012-ben elindult az EU FP7 keretprogramja által támogatott eHEROES program, melyben munkacsoport-vezetői szinten vesznek részt. Az ESA által elfogadott új exobolygó-kutató űrtávcső, a CHEOPS konzorciumi tagjai lettek. Szoros kutatási együttműködés alakult ki a University of Sydney-vel.

2012-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 MPA Heidelberggel, STSI Baltimore-ral. Szoros együttműködés volt a Harvard Smithonian 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: Workshop on Mars – Connecting Planetary Scientists in Europe (Budapest, 2012. június 5-7.), 5th KASC Workshop (Balatonalmádi, 2012. június 18-22.),

Az intézet kutatói több hosszabb tanulmányutat tettek az ESO központjában (Garching, Németo.), a University of Sydney-n (Sydney, Ausztrália), az MPI für Astronomie-ban (Heidelberg, Németo.) és Laboratoire d'Astrophysique-ban (Marseille, Franciaó.). Vendégkutatókat fogadtak Brazíliából, Csehországból, Franciaországból, Japánból és az Egyesült Államokból.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az év során elnyert és egyből elindult legfontosabb pályázat a Lendület program keretében elnyert Légyszem-kamera projekt volt, amely 200 MFt támogatást kapott az akadémiaától öt év futamidővel. A program célja egy különleges felépítésű teljeségbolt-kamera („Légyszem-kamera”) megépítése, amivel újszerű módon lehet majd követni az egy földrajzi helyről látszó teljes égbolt tranzien objektumait. A projekt tudományos célkitűzéseit tekintve szorosan kapcsolódik a 2020-as évek ambíciózus égboltfelmérő programjához, a Large Synoptic Survey Telescope-hoz (LSST). Két új OTKA-pályázat támogatásával folytatódik a csillagkörüli korongok fizikájának tanulmányozása (K101393, 21 M Ft, 2012–2015), illetve új témaként elindult a marsi vizes környezetek kutatása földi analógiák alapján (PD105970, 15,4 M Ft, 2012–2015). Sikerrel pályáztak a Gaia asztrometriai műholddal, illetve a CoRoT űrfotometriai távesső adatain végzett munka meghosszabbítására is az ESA PECS keretére. Jelentős OTKA és TÁMOP pályázati sikereket értek el, melyek munkájának megkezdése már átcúsúzott 2013 elejére.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Az év során 69 ISI szakcikket, publikáltak, melyek összesített impakt faktora 300.4. Az alábbi válogatás reprezentatív áttekintést ad a művelt szakterületekről.

1. Bakos GÁ, Hartman JD, Torres G, Béky B, Latham DW, Buchhave LA, Csubry Z, Kovács G, Bieryla A, Quinn S, Szklenár T, Esquerdo GA, Shporer A, Noyes RW, Fischer DA, Johnson JA, Howard AW, Marcy GW, Sato B, Penev K, Everett M, Sasselov DD, Fűrész G, Stefanik, RP, Lázár J, Papp I, Sári P: HAT-P-34b-HAT-P-37b: Four Transiting Planets More Massive than Jupiter Orbiting Moderately Bright Stars. *Astronomical Journal*, 144: id. 19 (2012)
2. Derekas A, Szabó GyM, Berdnikov L, Szabó R, Smolec R, Kiss LL, Szabados L, Chadid M, Evans NR, Kinemuchi K, Nemeč JM, Seader SE, Smith JC, Tenenbaum P: Period and light-curve fluctuations of the Kepler Cepheid V1154 Cygni. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 425: 1312 (2012)
3. Juhász A, Dullemond CP, van Boekel R, Bouwman J, Ábrahám P, Acosta-Pulido JA, Henning Th, Kóspál A, Sicilia-Aguilar A, Jones A, Moór A, Mosoni L, Regály Zs, Szokoly Gy, Sipos N: The 2008 Outburst of EX Lup—Silicate Crystals in Motion. *Astrophysical Journal*, 744: id. 118 (2012)
4. Jurcsik J, Hajdu G, Szeidl B, Oláh K, Kelemen J, Sódor Á, Saha A, Mallick P, Claver, J: Long-term photometric monitoring of RR Lyrae stars in Messier 3. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 419: 2173 (2012)

5. Kóspál Á, Ábrahám P, Acosta-Pulido JA, Dullemond CP, Henning Th, Kun M, Leinert Ch, Moór A, Turner NJ: Mid-infrared Spectral Variability Atlas of Young Stellar Objects. *Astrophysical Journal Supplement*, 201: id. 11 (2012)
6. Kővári Zs, Korhonen H, Kriskovics L, Vida K, Donati J-F, Le Coroller H, Monnier JD, Pedretti E, Petit P: Measuring differential rotation of the K-giant ζ Andromedae. *Astronomy and Astrophysics*, 539: A50 (2012)
7. Molnár L, Kolláth Z, Szabó R, Bryson S, Kolenberg K, Mullally F, Thompson SE: Nonlinear Asteroseismology of RR Lyrae. *Astrophysical Journal Letters*, 757: L13 (2012)
8. Muraközy, J; Ludmány, A: Phase lags of solar hemispheric cycles, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 419, 3624 (2012)
9. Pál A, Kiss C, Müller TG, Santos-Sanz P, Vilenius E, Szalai N, Mommert M, Lellouch E, Rengel M, Hartogh P, Protopapa S, Stansberry J, Ortiz J-L, Duffard R, Thirouin A, Henry F, Delsanti A: “TNOs are Cool”: A survey of the trans-Neptunian region. VII. Size and surface characteristics of (90377) Sedna and 2010 EK139. *Astronomy and Astrophysics*, 541, L6
10. Sódor Á, Hajdu G, Jurcsik J, Szeidl B, Posztobányi K, Hurta Zs, Belucz B, Kun E: The light-curve modulation of XY And and UZ Vir: two Blazhko RR Lyrae stars with additional frequencies. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 427: 1517 (2012)
11. Szabados L, Derekas A, Kiss Cs, Klagyivik P: Discovery of the spectroscopic binary nature of the Cepheids X Puppis and XX Sagittarii. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 426: 3154 (2012)
12. Szabó GyM, Pál A, Derekas A, Simon AE, Szalai T, Kiss LL: Spin-orbit resonance, transit duration variation and possible secular perturbations in KOI-13. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 421: L122 (2012)
13. Szabó GyM, Kiss LL, Pál A, Kiss Cs, Sárneckzy K, Juhász A, Hogerheijde MR: Evidence for Fresh Frost Layer on the Bare Nucleus of Comet Hale-Bopp at 32 AU Distance. *Astrophysical Journal*, 761: id. 8 (2012)

**AZ MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB
MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI ADATAI 2012-BEN**

Főbb mutatók 2012-ben

MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont*

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	206	Ebből kutató ² :	115	
PhD, kandidátus:	59	MTA doktora:18	Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			4	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			42	

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	417	
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	391	
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	33	
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	25	
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	209	
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	108	
Könyv, atlasz	magyarul: 4	idegen nyelven: 2
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 36	idegen nyelven: 29

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	364,245	Összes független hivatkozás száma:	2514
Összes hivatkozás száma ⁸ :	3203		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 5	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	140
	poszterek száma: 72
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 25	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 20
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	48
Témavezetések száma: TDK munka: 16	Diplomamunka (BSc): 33
Diplomamunka (MSc): 31	PhD: 48

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	1026 945	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	11	Teljes saját bevétel: 133 028 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	24	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 111 183	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	5	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:	7	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ : 5838	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	6	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel: 4909	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	117 246	E Ft

*A kutatóközponti adatok hitelesek, ellenőrzöttek; a kutatóközponton belüli intézeti adatok tájékoztató jellegűek

Részletezett pénzügyi adatok 2012-ben

MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	1026 945	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	133 028	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	111 183	E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	4201	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	1637	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	4909	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	44 671	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	13 219	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	56 336	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	3020	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA CSFK Földrajztudományi Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	35	Ebből kutató ² :	26
PhD, kandidátus:	10	MTA doktora:	5
		Rendes tag és levelező tag:	1
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, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			105
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			98
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			14
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			15
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			6
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 24	idegen nyelven:	22

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	8,65	Összes független hivatkozás száma (2011):	598
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			610

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			28
		poszterek száma:	9
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			12
Témavezetések száma: TDK munka:	7	Diplomamunka (BSc):	28
Diplomamunka (MSc):	16	PhD:	28

Főbb mutatók 2012-ben

MTA CSFK Földtani és Geokémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	27	Ebből kutató ² :	15
PhD, kandidátus:	7	MTA doktora:	2
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			5

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			53
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			52
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			7
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			19
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			18
Könyv, atlasz	magyarul: 2	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 11	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	34,066	Összes független hivatkozás száma (2011):	333
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			518

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			27
		posztterek száma:	17
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	8	PhD:	6

Főbb mutatók 2012-ben

MTA CSFK Geodéziai és Geofizikai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	50	Ebből kutató ² :	32	
PhD, kandidátus:	17	MTA doktora:4	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				7

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				43
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				42
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				8
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				6
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				16
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				17
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:		1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven:		1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	22,5	Összes független hivatkozás száma (2011):	364
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			538

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			20
		poszterek száma:	22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			9
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	6	PhD:	8

Főbb mutatók 2012-ben

MTA CSFK Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	78	Ebből kutató ² :	48	
PhD, kandidátus:	25	MTA doktora:9	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				18

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				221
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				204
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				4
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				167
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				69
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:		0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:		6

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	300,74	Összes független hivatkozás száma (2011):	1217
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			1536

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 3	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			65
		poszterek száma:	24
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	13	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	9
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			21
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	6

MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

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

telefon: (1) 395 9159, fax: (1) 395 9293

e-mail: gado.janos@energia.mta.hu

honlap: www.energia.mta.hu

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2012-ben

2012. január elsejével a Magyar Tudományos Akadémia létrehozta az MTA Energia-tudományi Kutatóközpontot. Az új kutatóközpont alapvető feladata az atomenergetikai kutatások mellett a megújuló és egyéb energiatípusokra vonatkozó kutatások végzése. A 2012-es év legfontosabb tudományszervezési feladata a két korábban önálló kutatóintézet (MTA KFKI Atomenergia Kutatóintézet és MTA Izotópkutató Intézet) tevékenységének összehangolása, a közös kutatási stratégia kialakítása volt. A 21. században az emberiség előtt álló kihívások közül az egyik legnagyobb a fenntartható energiatermelés biztosítása. Magyarországon a fenntarthatóság mellett ugyanilyen jelentőséggel bír az energiatudomány csökkentésének igénye. Az új kutatóközpont tevékenységének e célok megvalósítását kell szolgálnia.

Az év folyamán elkészült a kutatóközpont stratégiai kutatási terve. E tervek szerint a kutatóközpont egyre inkább az energiával kapcsolatos kutatásokat tekinti fő irányának. A kutatóközpont stratégiai kutatási terve két egymással harmonikus kapcsolatban lévő részből áll.

A kutatóközpont stratégiai kutatási tervének első része a nukleáris energia tárgykörében végzett kutatásokra vonatkozik, ez lényegében megegyezik az Atomenergia Kutatóintézet korábban kidolgozott stratégiai kutatási tervével. E terv gerincét három irány jelenti, a magyarországi nukleáris kutatások egészének figyelembevételével:

- a meglévő atomerőművi blokkokkal kapcsolatos fejlesztési igények,
- az épülő új blokkokkal kapcsolatos kutatási és fejlesztési igények,
- a távlatilag fontos negyedik generációs erőművekkel kapcsolatos kutatások, valamint az ettől elválaszthatatlan problémák, elsősorban a fűtőanyag ciklus zárásának problémái.

Természetesen a három fő irány csak az atomenergiával kapcsolatos kutatások orientációját határozza meg, és nem zárja ki a fő irányokkal csak lazább kapcsolatban lévő tudományterületek művelését. Ennek megfelelően, az Atomenergia Kutatóintézetben korábban nagy sikerrel művelt témák, mint például az ürdozimetria vagy a kis dózisok biológiai hatásának vizsgálata továbbra is elmaradhatatlan részei a stratégiai kutatási tervnek.

A kutatóközpont stratégiai kutatási tervének második része a többi (nem nukleáris) energia tárgykörében végzett kutatásokra vonatkozik. Ez a terv teljes egészében új, elkészítése a 2012. év eredménye. E stratégiai kutatási terv nyomán a korábbi Izotópkutató Intézet neve is megváltozott Energia- és Környezetbiztonsági Intézetre.

A stratégiai kutatási tervnek megfelelően az energia- és környezetbiztonsági stratégia keretében világszínvonalú alap- és alkalmazott kutatásokat, valamint szakértői tevékenységet kell folytatni az alábbi területeken:

- kompetencia kialakítása az energiatermelési technológiák teljes spektruma tekintetében,

- a különböző energiatermelési technológiák környezeti hatásainak és gazdaságosságának komparatív elemzése,
- a megújuló energiák és a hidrogén-gazdaság egyes technológiai elemeinek kísérletes kutatása,
- az energiatárolással kapcsolatos kísérletes kutatások,
- környezetbarát kémiai és más ipari eljárások tudományos hátterének kialakítása,
- energiatakarékos ipari technológiák tudományos hátterének kialakítása,
- veszélyes ipari berendezések technológiájának javítását célzó kutatások és fejlesztések.

A stratégia kutatási terv a 2012. év végére készült el, ez fontos kutatásszervezési eredmény. A tervnek megfelelő, a kutatóközpont egészét érintő kutatási eredmények a következő években várhatóak, a 2012. évben elért kutatási eredmények a két intézet eredményei, így ezek leírása a két intézet beszámolójában található.

Közvetlenül a kutatóközpont vezetése alá tartozó kutatócsoportok nincsenek.

MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ATOMENERGIA-KUTATÓ INTÉZET

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

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

e-mail: horvath.akos@energia.mta.hu

honlap: www.energia.mta.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az intézet kutatási koncepciója megfelelt a kutatóközpont stratégiai kutatási tervének, amelynek ismertetése a kutatóközpont beszámolójának I. pontjában található. E koncepció 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.

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

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Reaktorfizikai és multi-physics kutatások

A negyedik generációs reaktorokkal kapcsolatos kutatásokat a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség által finanszírozott NUKENERG projekt keretében végezték. A vizsgálatok egyik célja a szuperkritikus nyomású vízhűtéses reaktor (Supercritical Water-Cooled Reactor, SCWR) európai változatának, a HPLWR reaktornak (High Performance Light Water Reactor) stacionárius kapcsolt reaktorfizikai - termohidraulikai programrendszerének létrehozása volt. A 2012-ben lezárult NUKENERG projektben befejezték a HPLWR reaktor zónatervezési programrendszerének fejlesztését a négyzetes geometriájú finomhálós diffúziós modell rendszerbe integrálásával. Az új, pontosabb számítási apparátus segítségével elemezték a reaktor zónáját. Felvázolták, hogy a kazetták tervezésében és a töltétoptimalizálásban milyen irányú lépésekkel várható a burkolathőmérséklet jelentős csökkenése. Ugyancsak befejeződött a HPLWR reaktor biztonsági rendszereinek méretezése a szükséges biztonsági elemzések elvégzésével. A 2012 évi vizsgálatok során - a projekt megelőző részében kidolgozott tervek szerinti biztonsági rendszerekkel kiegészített számítási apparátussal - biztonsági elemzések készültek több változatban, melyek alapján értékelni lehetett a biztonsági rendszerek megfelelőségét. Ennek nyomán javaslat készült a megfelelő változatokra, azok paramétereire, melyek mellett a biztonsági elemzések elfogadási kritériumai teljesültek.

A NUKENERG projektben végzett tevékenység másik célja a IV. generációs folyékony fémhűtésű, gyors neutron-spektrumú reaktorok reaktorfizikai és biztonsági vizsgálata volt. Az alábbi gyorspektrumú fémhűtésű reaktorok biztonsággal és izotópháztartással kapcsolatos jellemzőit vizsgálták és hasonlították össze stacionárius állapotokban:

Nátriumhűtésű, oxid fűtőelemmel rendelkező tenyésztő gyorsreaktor nagy élethosszúságú hasadási termékek elégetésére

Ólomhűtésű, oxid fűtőelemmel rendelkező gyorsreaktor

Nagyteljesítményű karbid fűtőelemmel rendelkező nátriumhűtésű gyorsreaktor

Nagyteljesítményű oxid fűtőelemmel rendelkező nátriumhűtésű gyorsreaktor

Közepes teljesítményű fémes fűtőelemmel rendelkező nátriumhűtésű gyorsreaktor
Közepes teljesítményű oxid karbid fűtőelemmel rendelkező nátriumhűtésű gyorsreaktor.

A vizsgálatok eredményeképpen az adódott, hogy a nátrium-hűtésű változatok közül a karbidos üzemanyagú nagy méretű zóna a legperspektivikusabb. Ennek nagy abszolút értékű Doppler-együtthatója kompenzálhatja a pozitív üregegyütthatót, elegendően alacsony az abszorbensek értékessége, ami a nem tervezett abszorbens mozgásokkal járó üzemzavarok esetén kedvező, ugyanakkor a zóna lezárhatóságának követelménye mindig teljesül. A nagy értékességű abszorbensek a közepes méretű zónákban komoly problémát jelenhetnek a biztonság szempontjából. A fém üzemanyagú koncepció helyzetét tovább rontja a kis Doppler-együttható. A konverziós tényező szintén a karbidos nagy teljesítményű zónára a legkedvezőbb, jóval 1 fölött van. Viszonylag magas hőmérsékleten, közel 1000 °C-on üzemel, ez kicsivel van az oxidos üzemanyagok hőmérséklete alatt, de az üzemanyag olvadáspontja és a hővezetési tényezője is magas (előbbi ~2500 °C), ráadásul – az oxidos üzemanyaggal szemben – nehezen lép kölcsönhatásba a nátriummal.

Az Euratom FP7 keretében létrejött *Supercritical Water Reactor - Fuel Qualification Test (SCWR-FQT)* projekt végső célja a csehországi LVR-15 kutatóreaktorban elhelyezni tervezett, fűtőelem pálcákat tartalmazó szuperkritikus tartományban üzemelő besugárzó-csatorna megtervezése és a hatósági engedélyezéshez szükséges elemzések elvégzése nemzetközi együttműködés keretében. Az intézet a reaktivitás üzemzavarok elemzésének előkészítéseképpen 2012-ben kifejlesztette az LVR-15 reaktor és a besugárzó-csatorna kvázistacionáris kapcsolt neutronfizikai-termohidraulikai modelljét (KARATE-LVR). A kutatóreaktor kiegészítő számításai alapján elemezték a fűtőelem pálcák teljesítményprofilját a besugárzás során. Kiszámították a besugárzó csatorna vastag nyomástartó acélcsővében fejlődő hőtéljesítményt és kimutatták, hogy figyelembevétele nem elhanyagolható módon változtatja meg a csatorna hűtővizének hőmérséklet-eloszlását. Konzervatív feltevésekkel élő fűtőelem pálcák bomlási hő görbét határoztak meg, melyet a projekt résztvevői a biztonsági elemzésekben hasznosítanak. Megkezdtek a KIKO3D-ATHLET kódon alapuló dinamikai modell fejlesztését.

A jelenlegi és a közeljövőben létrehozandó reaktorok (pl. új paksi blokkok) 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 (biztonsági sávok konfidencia jellemzőkkel) kiszámíthatók úgy a normál üzem, mint az üzemzavarok esetén. Ennek során az AEKI részt vesz az OECD NEA jelenleg folyó, WPRS UAM („Uncertainty Analysis in Modeling”) együttműködésben, és 2012-ben elvégezte annak a COBRA szubcsatorna kódnak a bizonytalansági elemzését stacionárius és tranziens üzemmódban, amit a tervezett multi-physics vizsgálatokban fognak használni.

Termohidraulikai kutatások

A Paksi Atomerőmű megrendelésére folytatódott a CERES berendezésen a kísérleti munka. A 2010 – 2011 években végzett CERES mérésekkel megvizsgálták a reaktortartály külső hűtésére kiépítendő rendszer működőképességét a hűtőcsatorna geometriai jellemzőinek változtatása mellett. A paksi, a NUBIKI-s és az OAH-s szakemberek is felvetették, hogy ilyen baleseti állapotban az erőműben jelentős a bórsav koncentráció a „zsompvíz”-ben. Felmerül a kérdés, ha a hűtésre hosszú ideig szükség van – akár a fukusimai példa alapján is – a

hűtőközegekből kirakódó bórsav nem akadályozza-e a tartály külső hűtését. Mivel a CERES berendezés az egyéb rendszerektől szeparáltan üzemeltethető, alkalmas arra, hogy bórsavval, vagy bórsav-kiválást modellező sóoldattal végezzék el a hűtési kísérleteket. Az eddigi eredményeik megmutatták, hogy a hűtés folyamán periodikusan gőz képződik a hűtőcsatorna kritikus szűkületében, ami bórsav kiváláshoz, és ezáltal a szűkült keresztmetszet esetleges eltömődéséhez vezethet. A hosszúidejű (kb. 24 óra) működési idő biztosításához a berendezés visszatérő ágába egy speciális hűtőt építettek be, amivel stabilizálhatják a „zsompvizet” szimuláló tartály hőmérsékletét. A bóros víz hatását egyrészt a hűtés esetleges leromlásával, illetve a mérés után a berendezés kritikus részeinek szétszerelésével és a kirakódások szemrevételezésével/fényképezésével detektálhatják. A mérés közben mintavételezéssel folyamatosan ellenőrizni lehet a „zsompviz” bórsav/só koncentrációjának változását. A méréseket 14 – 40 g/kg bórsav koncentráció mellett folyamatosan végezték.

A Paksi Atomerőmű a ZÜHR rendszerek csővezetékeire tett vízütes megállapítások kísérleti igazolását is kérte, ugyanis több olyan bizonytalanságot tartalmaz az elméleti vizsgálat, amelyeket csak kísérlettel lehet tisztázni. Ezért egy 1:1 méretű modell megépítésével és több méréssorozat elvégzésével igazolták, hogy a megadott feltételek mellett nem alakul ki vízütés az erőmű vizsgált csőszakaszain. 2012-ben a rendelkezésükre álló nagyszámú mérési adat felhasználásával kidolgoztak egy módszert az erőművi csővezetékek minősítésére, amivel WAHA számítások nélkül is különböző paraméterek alapján eldönthető a kondenzációból eredő vízütés létrejöttének lehetősége.

A Paksi Atomerőműben a leállási PSA felülvizsgálatára készülve hiányosságként merült fel a leállási fázisban, nitrogén párna mellett bekövetkező folyásos üzemzavarok elemzése. A következmény-elemzés az eseményfák aktualizálása miatt szükséges. Mivel a paksi atomerőműre eddig kizárólag a nagyméretű LOCA esetét vizsgálták, ezért 2012-ben elvégezték néhány – az MVM PA Zrt. által specifikált – kisebb méretű törés számítását.

Az Európai Unió 7. Kutatási Keretprogramjának GoFastR projektje, valamint francia/cseh/szlovák/lengyel együttműködésben megvalósuló ALLEGRO konzorcium keretében a CFD eszközök alkalmasságát vizsgálták a német L-STAR kísérleti berendezésen kapott, levegő hűtőközeggel végzett mérések alapján. Folytatódta továbbá az üzemzavar-elemzési számítások a CATHARE kóddal az ALLEGRO kísérleti gyorsreaktorra, ezek ugyanis szükségesek a reaktor biztonsági jelentésének létrehozásához.

A PKL-3 projekt programjának megfelelően 2012-ben csupán a PKL kísérleti berendezésen végeztek kísérletet, az MTA EK PMK berendezésén egyelőre az első kísérlet előkészítése történt meg.

Fűtőelem és reaktoranyag kutatások

2012-ben magas hőmérsékletű oxidációs tesztek hajtottak végre 1000 °C-on és 1200 °C-on, 300 és 600 ppm hidrogéntartalmú, új gyártási technológiával, fémszivacsból előállított E110G burkolattal. A különböző hidrogéntartalmú burkolatminták oxidációs kinetikájában nem tapasztaltak számottevő különbséget. A mechanikai vizsgálatok szerint az eredeti burkolatok képlékenyebb viselkedést mutattak, mint a hidrogént tartalmazó minták. A nagyobb hidrogéntartalom ridegebb viselkedést eredményezett. A kísérletek alapján megállapítható, hogy a burkolat normál üzemi hidrogén felvétele negatív hatást gyakorolna a fűtőelem burkolat mechanikai tulajdonságaira LOCA esemény bekövetkezésekor.

A szivárgó fűtőelemeknek a Kiegészített Kazetták Átmeneti Tárolójában történő elhelyezéséhez forrástag becslés készült. Az MTA EK szakértői a fűtőelemből történő kikerülést számolták ki különböző esetekre. A számítási modellek részben a fizikai folyamatok követésén, részben mérnöki becslésen alapultak. A nedves oldódást számító modellben paksi mérések adatait használták fel. Az üzemzavari forrástagokra konzervatív módon integrális adatokat adtak meg feltételezve, hogy a fűtőelemben maradt összes oldott aktivitás jelenti a forrástagot. A számítások eredményei elősegítik a döntéshozatalt a szivárgó fűtőelemek KKÁT-ban történő tárolásának engedélyezéséről.

A FRAPTRAN fűtőelem-viselkedési kóddal, egy OECD projekt keretében modellezték a japán NSRR és francia CABRI kísérleti reaktorokban végzett RIA (reactivity initiated accident) kísérleteket. A tranziensek előtti több éves besugárzásokat a FUROM kóddal megfelelő módon szimulálták. Az MTA EK eredményei nem mutattak kirívó eltéréseket projekt többi résztvevőinek eredményeitől, általában a középmezőnyben helyezkedtek el, közel a mért adatokhoz. Összességében elmondható, hogy a CABRI és a NSRR OECD RIA benchmark feladatok számítása során széleskörű modellezési tapasztalatokra tettek szert, eredményeik világviszonylatban is megállják a helyüket, az elért tapasztalatokat a jövőbeli paksi munkákban is felhasználhatják.

A STYLE projekt keretében egy VVER-440 típusú reaktortartály fővízköri csonkja tranziens-varratának kicsinyített mintája készült el, melyen többféle eljárással is meghatározták a hegesztés során keletkezett maradófeszültséget. A maradófeszültség értékének ismerete nagyon fontos a valódi szerkezet biztonságának megítélése szempontjából, ám arra vonatkozóan igen kevés empirikus adat, és még kevesebb számítással készített elemzés áll rendelkezésre a nemzetközi irodalom szerint. Éppen ezért az elkészült modellen végzett mérések hiánypótlónak számítanak. A kutatások során elkészült a varrat készítését követő, a MARC programrendszerben készített 3 dimenziós véges elemes szimulációs modell is, amely a hegesztés szimulációját hajtja végre. Elmondható, hogy a projekt kísérleti és számítási munkái során magasszintű kísérleti és numerikus szimulációs munkát végeztek, melynek eredményei világviszonylatban is megállják a helyüket; a tapasztalatok a jövőben a paksi munkáknál is felhasználhatók lesznek.

Az év során elkészült a Budapesti kutatóreaktorba tervezett új besugárzó berendezés, a BAGIRA II, amely alkalmas lesz a besugárzások idején végzendő mechanikai anyagvizsgálati kísérletek végzésére is. Ilyen kísérleti berendezés jelenleg csak néhány működik a világban, ezért a szerkezet hiánypótlónak számít a maga kategóriájában. A tesztüzem eredményesen befejeződött, ennek alapján az OAH NBI a berendezés működési engedélyét megadta. A tényleges kísérleti munka 2013 első negyedévében kezdődhet meg.

Reaktor monitorozási és szimulációs rendszerek fejlesztése

2012-ben folytatódott a VERETINA nevű csatolt neutronfizikai-termohidraulikai kódrendszer kidolgozása. A Paksi Atomerőmű megrendelésére készülő rendszer a tervek szerint a jelenleg használt modelleknél részletesebben és pontosabban képes leírni a reaktor aktív zónájában fellépő áramlási és hőfizikai jelenségeket. A rendszer fejlesztése több fázisban történik, még 2011-ben elkészült a rendszer koncepciója és rendszerterve, továbbá kidolgozták a kódok validációs és verifikációs (V&V) eljárásának a tervét. Megvalósultak az 1. fázis fejlesztési feladatai és előzetes számításokat végeztek az új modellel. 2012-ben a második fejlesztési fázis valósult meg: kialakították a zóna kazettanódusz-szintű leírását, majd paksi üzemviteli

adatok alapján elvégezték az előírt V&V számításokat. Megtörtént a rendszer felhasználói és fejlesztői dokumentációjának kidolgozása is.

2012-ben folytatódtak az új paksi atomerőművi blokkok létesítésének előkészítéséhez kapcsolódó tevékenységek. A legfontosabb munka a tenderkiírás készítésében történő részvétel volt, az MVM Zrt. Lévai projekt keretében. Több tender-alfejezet véglegesítése és háttéranyagok készítése mellett a laboratórium végezte az MTA EK által a Lévai projektben végzett munkák koordinálását is.

2012-ben is folytatták a rendszeres reaktor diagnosztikai méréseket a Paksi Atomerőmű összes blokkján és elvégezték a kapcsolódó kiértékeléseket. A havonta végzett mérések során keletkezett zajdiagnosztikai mérési adatokat a blokkok állapotának szisztematikus figyelésére használták, az elemzések az aktív zónán átáramló hűtőközeg forgalmának monitorozására és a zónán belüli szerkezetek rezgéseinek detektálására irányultak. Az elemzések egyik blokkon sem tártak fel technológiai rendellenességet vagy egyéb műszaki problémát.

A Paksi Atomerőmű blokkjain és teljes léptékű oktatószimulátora mellett jelenleg működő blokkszámítógép (BSZG) rendszerek felújítása időszerűvé vált, mert a BSZG hardver eszközei és operációs rendszere az elmúlt 15 év alatt elavultak. A blokkszámítógép hosszú távú rendelkezésre állásának és megbízható működésének garantálása miatt az erőmű úgy döntött, hogy egy koncepcióterv készítésével alapozza meg a BSZG felújítását. A koncepció elkészítésére a Scadanet Kft. kapott megbízást, az MTA EK alvállalkozóként működött közre a munkában. A koncepcióterv az alábbi kérdéseket tárgyalta részletesen:

- a jelenlegi BSZG értékelése felhasználói, üzemeltetői és karbantartói szempontból,
- a felújítás során megvalósítandó funkciók felmérése,
- javaslatok megfogalmazása a felújítás során alkalmazandó műszaki megoldásokra,
- a felújítás során elvégzendő feladatok azonosítása és a feladatok ütemezése,
- megalapozott becslés összeállítása a felújítás várható költségeire.

A közös munka eredményeképpen 2012 végére elkészült a BSZG felújítás koncepciója, melynek zsűrizése 2013 elején fog megtörténni. A tervek szerint az erőmű által elfogadott koncepcióterv a BSZG felújítás egyik alapvető dokumentuma lesz, mely alapján 2013-ban megindulhat a felújított rendszer részletes számítástechnikai tervezése.

A Paksi Atomerőmű 2012-ben elhatározta, hogy a teljes léptékű szimulátor terjedelmének kiterjesztésével, bővítésével egy olyan eszközrendszert alakít ki, amely felhasználható a személyzet képzésére az ún. súlyos baleseti folyamatokkal kapcsolatban. A bővítést egyrészt a fukusimai baleset után elvégzett Célzott Biztonsági Felülvizsgálat eredményeként előirányzott intézkedések, másrészt új oktatási igények és a szimulációs modellek pontosítására irányuló törekvések indokolták. Az erőmű az MTA Energiatudományi Kutatóközpontot és a NUBIKI Kft-t bízta meg, hogy készítsen el egy értékelő tanulmányt, amely összegzi a súlyos baleseti szimulátorok használatára vonatkozó aktuális nemzetközi tapasztalatokat és technikai megoldásokat, valamint számba veszi a paksi szimulátor továbbfejlesztésének lehetőségeit, a bevonható potenciális partnereket, beleértve a hazai és külföldi lehetőségeket is. A közös munka eredményeképpen 2012 végére elkészült egy koncepcióterv, amely elemzi a fenti feladatok megvalósíthatóságát, modellezési, számítástechnikai és egyéb szempontokat (pl. fejlesztési és kivitelezési kérdéseket) figyelembe véve. A tervek szerint az erőmű által elfogadott koncepcióterv a szimulátor bővítésének alapvető dokumentuma lesz, melynek alapján egy későbbi időpontban megindulhat a súlyos baleseti szimulációs modul részletes tervezése.

Az Országos Atomenergia Hivatal (OAH) részéről 2012-ben felmerült az igény, hogy a Budapesti Kutatóreaktor (BKR) kijelölt mérési adatait elérje a CERTA központban, ahol az OAH Balesetelhárítási Szervezetének szakértői nukleáris vagy radiológiai veszélyhelyzetben dolgoznak (CERTA = Centre for Emergency Response, Training & Analysis, Veszélyhelyzeti Intézkedési, Gyakorló és Elemző Központ). Az OAH megbízásából egy megvalósíthatósági tanulmány készült, amely megalapozott javaslatot ad a BKR mérési adatainak továbbítására a CERTA központba, továbbá specifikálja az adatok felhasználásának és megjelenítésének módszereit. A 2012 végére elkészült tanulmány részletesen leírja a BKR információs rendszerében használható adatkiolvasási eljárásokat, továbbá az adatátvitel gyakorlati megvalósításához javasolt informatikai koncepciót. A tanulmány javaslatot tesz az adatátvitel terjedelmére, specifikálja az on-line adatkapcsolat műszaki megvalósításához szükséges számítástechnikai eszközöket, a kapcsolódó fejlesztési feladatokat, továbbá a kivitelezéshez szükséges egyéb tevékenységeket. A tervek szerint az adatátvitel gyakorlati megvalósítására 2013-ban kerül sor, az OAH által elfogadott koncepció alapján.

Sugárvédelmi kutatások

Az EK-ban (korábban AEKI) kifejlesztett *Pille-MKSz* dózismérő rendszer 2003 óta a Nemzetközi Űrállomás (ISS) orosz modulján a dozimetriai szolgálati rendszer része. Segítségével rendszeresen végeznek méréseket a dóziseloszlás feltérképezésére, mérik az űrhajósok személyi dózist őrseták alatt és rendkívüli naptevékenység idején, illetve részt vesznek fedélzeti kísérletekben. A több ezer elvégzett mérés eredményét 2012-ben – a korábbi évekhez hasonlóan – feldolgozták és nemzetközi szakmai fórumokon ismertették. Megkezdődött a *Pille-MKSz* rendszer dozimétereinek továbbfejlesztése.

A *Pille* tapasztalatai alapján az AEKI-ben kifejlesztett földi, kereskedelmi célú *PorTL* rendszert az AEMI Atomenergia Mérnökiroda Kft. hasznosítja. 2012-ben a *PorTL* rendszer részt vett az EURADOS IC2012 személyi dózismérő rendszerek összemérésén, ahol bebizonyította, hogy kiválóan alkalmas személyi dozimetriai célokra is.

Az elmúlt években kifejlesztett 4π térszögben közel egyenletes érzékenységgel rendelkező háromtengelyű szilícium detektoros űrdozimetriai teleszkóp (*TriTel*) egy példánya feljutott a Nemzetközi Űrállomás európai Columbus moduljának a fedélzetére, ahol 2012 novembere óta folyamatosan végez méréseket. A készülék az elnyelt dózis mellett a LET (lineáris energiaátadási tényező) és a sugárzási minőségi tényező meghatározására is alkalmas, így segítségével kiszámítható a sugárzás biológiai károsító hatására jellemző dózisegyenérték.

Az Európai Űrügynökség (ESA) REXUS/BEXUS programjának keretében – egyetemi hallgatókkal együttműködve – egy aktív (*TriTel* teleszkóp, GM-számlálók) és passzív dózismérő rendszereket (*Pille* bura dózismérőket, nyomdetektor neutron dozimétereket, nagy érzékenységgű TL tablettákat) tartalmazó kísérlettel (*TECHDOSE*) sikeres méréseket hajtottak végre Észak-Svédországban, a BEXUS-14 sztratoszferikus ballon fedélzetén.

Az ESA üstökös-kutató űrszondája, a *Rosetta* 2014-ben éri el a 67P/Csurjumov-Geraszimenko üstökösöt. Az EK közreműködésével két műszer készült (a ROMAP/SPM plazma- és a SESAME/DIM pordetektor) az űrszonda leszálló egységére. Az EK munkatársai 2012-ben is folytatták a leszállási és az üstökös felszínén elvégzendő program előkészítését, valamint a mérőműszerek földi kalibrálását.

A Nemzetközi Űrállomás két orosz szegmensében a kozmikus sugárzási viszonyok felmérése az Orosz Tudományos Akadémia Orvosbiológiai Problémák Intézetével (RAS IBMP) együttműködésben 2010-ben indult el, és további detektorok 2011-ben történő feljuttatásával már három szegmensben folytatódott. A program neve DoseMap (SPD). Az első fázisban a Földre visszahozott detektorok kiértékelése és elemzése 2012-ben befejeződött, és elkezdődött a második fázis detektorainak kiértékelése is. Az eredmények nemzetközi résztvevőkkel közös publikációban rövidesen megjelennek. A dózistérképezésre irányuló vizsgálatok továbbfejlesztett eszközök Űrállomásra juttatásával folytatódtak.

2010-ben új feladatként jelentkezett a kozmikus sugárzás mélységi eloszlásának biológiai rendszerekben történő meghatározása (BioTrack program), szintén az IBMP-vel együttműködésben. A feladat elvégzésére tervezett eszközök négy ütemben érkeznek vissza a Földre kiértékelésre. Eddig 2011-ben és 2012-ben érkeztek detektorok, melyek értékelése 2012-ben történt. További két egység visszaérkezése 2013-ban esedékes.

Az eddigi SPD és BioTrack detektorok kiértékelésének eredményei visszatükrözték a naptevékenység változását a vizsgált három éves időszakban és néhány rendkívüli napkitörés hatását az Űrállomáson. Az IBMP felkérésére 2011-től folyamatosan részt vesznek az orosz űrhajósok kozmikus sugárzásból eredő dózisterhelésének vizsgálatában.

Az EK kutatói több európai kutatóintézettel közösen részt vesznek az Európai Űrügynökség (ESA) szervezésében zajló, a Columbus modul dózistérképezésére irányuló kutatásokban, a DOSIS-3D programban, amely 2012-ben indult és hat ciklusra tervezték.

Az EK-ban készült mérőegységek is beletartoznak azon eszközök sorába, melyekkel Magyarország hozzájárul a Nemzetközi Űrállomáson a kozmikus sugárzás spektrumának és az integrális dózisonak a meghatározásához, ezzel jelentősen növelve hazánk műszaki és tudományos hírnevét.

A SINAC környezeti szimulátor programrendszer segítségével modellezhető a környezetbe került radioaktív anyagok terjedése és kiülepedése, a kialakuló dózisok, a várható egészségi hatások, valamint a korai óvintézkedések bevezetésének hatásai. A program új verziójának első fejlesztési szakasza 2012-ben lezárult. Az EK munkatársai ebben az évben átfogó tesztelést hajtottak végre az elkészült programon és elkészítették a program használatát segítő oktatási anyagot.

Környezetfizikai kutatások

A kutatóközpont új kutatási profiljának megfelelően, az átszervezéssel kialakult Környezetfizikai Laboratórium keretében kidolgozásra került, a környezetbarát energiatermelés és tárolás kutatási stratégiája. A meglévő humán és laboratóriumi erőforrásokra, valamint a szerteágazó egyetemi és ipari kapcsolataikra alapozva egy középtávú kutatási tervet készítettek, melyet november hónapban az MTA is megkapott. A megújuló energiák kutatási stratégiája a kutatóközpontnak az energiatermelés területén megszerzett szaktudására és a meglévő kutatási infrastruktúrára épül, és szervesen illeszkedik egy szélesebb fosszilis – nukleáris – megújuló kutatási keretbe. A főbb kutatási irányok magukba foglalják a széndioxid-tárolási vizsgálatokat, a biomaszta tüzelés optimalizálását, a szélturbina lapátforma kialakításának modellezését, a sóolvadékok termo-hidraulikai elemzését, az új energiátárolási rendszerek vizsgálatát, a hidrogéntárolás kutatását és az intelligens hálózatok modellezését.

A nagyaktivitású radioaktív hulladékok mélygeológiai tárolóban történő biztonságos elhelyezésének témájában, svájci együttműködés keretében, magyar és svájci mélygeológiai tároló alapközetének szorpciós kapacitását vizsgálták. A Bodai Agyagkő Formáció agyagos kőzeteiből készült csiszolatokon meghatározták, hogy mely ásványok játszanak döntő szerepet a radionuklidok megkötésében. A laboratóriumi és szinkrotronos fluoreszcens és abszorpciós röntgenspektroszkópi mérések alapján megállapították, hogy a nikkeltől a Cs is az agyagásványokhoz kapcsolódik, míg az U eltérően viselkedik. Az urán megkötésében a kőzet Fe-Mg-karbonát (ankerit) tartalma is jelentős szerepet játszik. A megkötött uránnak megközelítőleg 25 %-a az ankeritek mállása révén létrejött FeOOH fázishoz kapcsolódik.

A kis dózis kutatások 2012-es eredményei közül kiemelkedik a légúti primer radioizotóp kiülepedés és a feltisztult hányad okozta sugárterhelések összehasonlítása, mely arra a következtetésre vezetett, hogy e két hányad nagyságrendileg megegyezik egymással. A radon leányelemek példáján bemutatták továbbá, hogy a sugárterhelés egyenletlenségét nem szükséges, de nem is lehetséges figyelembe venni a jelenlegi sugárvédelmi szabályozásban, mivel a nominális kockázat, az effektív dózis és az egyenértékű dózis lineáris függvényei az elnyelt dózissal. Rámutattak arra, hogy a kis dózis tartományra jellemző, nemlineáris dóziszfüggésű jelenségek jelentősége feltételezhetően kisebb a belélegzett radonleányelemek tudóré gyakorolt hatása esetén, mint olyan sugárforrásoknál, melyek térben egyenletes sugárterhelést eredményeznek.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének főbb eredményei

A Budapest Kutatóreaktor Műszerközpont (BKM) fő feladata, hogy biztosítsa a Budapesti Kutatóreaktor berendezéseinek hatékony kihasználását az alap és alkalmazott kutatások területén. Ennek érdekében a BKM évek óta működtet egy nemzetközi „user” programot, amelynek keretében hazai és nemzetközi kutatók pályázhatnak mérési időre. A pályázatokat egy nemzetközi bíráló bizottság értékeli és rangsorolja. A rendkívül nagy mérési idő igény miatt, a BKM csak kiváló és nagyon jó pályázatok számára tud mérési időt biztosítani.

2012. május végén rendezték a Közép-európai neutron-szórásos iskolát. A programnak 30 résztvevője volt, legtöbben a közép-európai régióból érkeztek. Az iskolát 11. alkalommal rendezték meg, a nagyon-nagy érdeklődés miatt az iskola szervezőbizottsága úgy döntött, hogy 2013-tól évenként rendezi meg az iskolát, nem két évente.

2008-ban alakult a Budapesti Kutatóreaktor kezdeményezésére a kelet-európai reaktorok koalíciója. Az elmúlt évben együttműködés az oktatás-tréning, az izotópgyártás, a reaktor nagyberendezéseinek kihasználtsága és az anyagvizsgálat-besugárzás területén valósult meg.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet tevékenységéről és eredményeiről időközönként internetes hírportálokon, napilapokban, valamint rádió- és televízió műsorokban számol be.

Az MTA Tudomány Ünnepe rendezvénysorozat keretében több előadás hangzott el, amelyeken részben a legérdekesebb kutatások és azok eredményeinek ismertetése volt a cél, részben pedig a kutatóintézet stratégiájának megismertetése a szélesebb közönséggel.

A Budapesti Kutatóreaktor 2012-ben is számos vendéget fogadott, elsősorban diákcsoportokat, de meg kell említeni az Amerikai Egyesült Államok Nagykövetségének nagy

létszámú csoportját is, amelynek tagjai élénk érdeklődést mutattak a reaktor és az azon végzett kutatások iránt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A Fenntartható Atomenergia Technológiai Platform 2012-ben folytatta tevékenységét, ennek során tovább finomították a következő néhány év nukleáris kutatásainak tervét, figyelembe véve a magyar atomenergetika igényeit és 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 platform finanszírozására új lehetőség nyílt az atomenergiával kapcsolatos kormány-előterjesztés nyomán, ez most a tavalyinál több optimizmusra ad okot a platform jövőjével kapcsolatban.

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. 2012 során az előkészítő tevékenységek folytatódtak.

Az intézet kutatói mind az Eötvös Loránd Tudományegyetemen, mind pedig a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen aktívan részt vesznek mind az alapoktatásban mind pedig a posztgraduális képzésben. Az ELTE-n az AEKI kutatói a vegyészet, ezen belül a fizikai kémia oktatásában tevékenykednek, a 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 kutatóintézettel és egyetemmel, elsősorban Európában, de a tengerentúlon is.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az elnyert nemzetközi pályázatok jó része 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.

Az EU FP7 keretprogramból 2012-ben kiemelkedett az NMI3-II pályázat, amely a Budapesti Kutatóreaktoron folytatott kísérleti kutatások fedezetéhez adott jelentős hozzájárulást.

A hazai pályázati lehetőségek az elmúlt évek során igen szűkösek voltak, a 2012. év során feltámadt a remény a jelentősebb pályázati lehetőségek újraindulására, ezen belül elsősorban az ALLEGRO prototípus gyorsreaktorral kapcsolatban van jó esély sikeres pályázatra, amely lehetővé tenné a perspektivikus problémákkal való intenzívebb foglalkozást.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Imre R., Deiters UK, Kraska T, Tiselj I: The pseudocritical regions for supercritical water. Nuclear Engineering & Design, 252 3: 179-183 (2012)

2. Vér N, Matus L, Pintér A, Osán J, Hózer Z: Effects of different surfaces on the transport and deposition of ruthenium oxides in the high temperature air. *Journal of Nuclear Materials*, 420: 297–306 (2012)
3. Kobayashi S, Gillemot F, Horváth Á, Székely R: Magnetic properties of a highly neutron-irradiated nuclear reactor pressure vessel steel. *Journal of Nuclear Materials*, 421: 112-116 (2012)
4. Márkus A, Házi G: Numerical simulation of the detachment of bubbles from a rough surface at microscale level. *Nuclear Engineering and Design*, 248: 263-269 (2012)
5. Szabo J, Palfalvi J K: Calibration of solid state nuclear track detectors at high energy ion beams for cosmic radiation measurements: HAMLET results. *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A*, 694: 193-198 (2012)
6. Szőke I, Farkas Á, Balásházy I, Hofmann W: 3D-modeling of radon-induced cellular radiobiological effects in bronchial airway bifurcations: direct versus bystander effects. *International Journal of Radiation Biology*, 88:(6) 477-492 (2012)
7. Reinhardt F, Osán J, Torok S, Pap AE, Kolbe M, Beckhoff B: Reference-free quantification of particle-like surface contaminations by grazing incidence X-ray fluorescence analysis. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 27:(2) 248-255 (2012)
8. Frey K, Iablokov V, Sáfrán G, Osán J, Sajó I, Szukiewicz R, Chenakin S, Kruse: N Nanostructured MnOx as highly active catalyst for CO oxidation. *Journal of Catalysis*, 287: 30-36 (2012)

MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
IZOTÓPKUTATÓ INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33.; 1525 Budapest, Pf. 49.
telefon: (1) 392 2531; fax: (1) 392 2533
e-mail: wojnarovits.laszlo@energia.mta.hu; honlap: www.iki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az Izotópkutató Intézet feladatai négy fő kutatási irányba estek 2012-ben is: nukleáris analitikai, valamint sugárhatáskémiai módszerek fejlesztésére és alkalmazására, sugárbiztonsági kutató-fejlesztő tevékenység ellátására, továbbá felületkémiai és katalitikus vizsgálatok végzésére.

A nukleáris analitika és kémia vonatkozásában a kitűzött feladat a módszerek (PGAA, NAA, XRF, és Mössbauer spektroszkópia) fejlesztése és alkalmazása az anyagtudományok, a kémia, a kulturális örökség megismerése, a geológia, a biológia, a nukleáris adatok és a magfizika területén, továbbá az anyag makroszkópikus szerkezetének és a technikai eszközökben lejárló folyamatok vizsgálata volt neutron-, röntgen- és gamma-radiográfia illetve tomográfia felhasználásával. A nukleáris analitikai kutatóhely ezen kívül részt vett a Budapest Neutron Centrum (BNC) felhasználóinak kiszolgálásában az EU FP7 NMI3, az EU FP7 CHARISMA és az EU FP7 ERINDA projekteknél, továbbá a NAP VENEUS08 konzorcium és egyéb pályázatok munkájában.

A sugárhatáskémiai területen nagyenergiájú sugárzások alkalmazásának és szennyvíz-kezelésre használható módszerek továbbfejlesztésének, vízben oldott szerves szennyezők lebontási folyamatainak, valamint polimerek sugárállóságának és sugárzásos módosításának (sugárzással iniciált ojtás) tanulmányozását tűzték ki feladatul.

A sugárbiztonsági kutató-fejlesztő tevékenység terén célul tűzték ki gamma spektrometria alkalmazását uránminták és reaktor üzemanyag reprocesszálságának vizsgálatára, a lumineszcencián alapuló dozimetria alkalmazási lehetőségeinek bővítését új detektoranyagok és új mérési eljárások kifejlesztésével, hosszú felezési idejű aktinidák meghatározási módszereinek kidolgozását biológiai és környezeti mintákban LA-ICP-MS technikával, Sunna doziméter film technológiai alkalmazási lehetőségeinek kiterjesztését infravörös emissziós mérésekkel, urán-oxid termékek felületi állapotjellemzőinek vizsgálatát ESCA és Auger elektron-spektroszkópiával, neutron-koincidenciás adatgyűjtő rendszer szoftverének fejlesztését és végül PuBe neutronforrások plutónium tartalma meghatározásának pontosítását.

Felületkémiai és katalitikus vizsgálatok terén célul tűzték ki egyrészt a C1 molekulák kémiai energiája felhasználhatóságának tanulmányozását metán száraz reformálásánál, másrészt katalizátorok fejlesztését biogázokból, illetve tüzelőanyag-cella táplálására szolgáló hidrogénből az N₂O metánnal történő reakciójával, illetve a CO preferenciális oxidációjával történő eltávolítására, harmadrészt környezetvédelmi technológiák alkalmazási lehetőségeinek vizsgálatát nagy szerves anyag tartalmú folyékony hulladékok nedves oxidációjában, valamint gázolajok kéntelenítésében, negyedrész katalizátorok fejlesztését és tanulmányozását légnemű szennyezések és korom oxidációjára, ötödrész arany tartalmú kétfémes katalizátorok alkalmazását aerob szelektív oxidációs folyamatokban, és végül növényolajokból származó olajsav katalitikus dekarboxilezésének vizsgálatát radioizotópos nyomjelzéstechnika alkalmazásával.

Az előbb részletezett feladatokon túlmenően az intézet ellátja a hosszú múltra visszatekintő műszaki szakértői háttértevékenységet is az Országos Atomenergia Hivatal számára nukleáris

biztosítéki vonatkozásokban, ill. a sugárbiztonság, a radioaktív anyagok szállítása, nyilvántartása, és ismeretlen eredetű radioaktív anyagok azonosítása terén.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A nukleáris analitika és kémia terén

Kiemelkedő kutatási eredményeket a nukleáris analitika terén ipari katalitikus folyamatok in situ & in beam PGAA módszerrel történő vizsgálata hozott.

A műanyagipar számára fontos a nyomnyi mennyiségű alkinek eltávolítása szelektív hidrogénezéssel etilén és propilén betáplálási anyagáramból. A folyamathoz használt referencia katalizátor a palládium. *In situ & in beam* vizsgálataik szerint a reakció a felszín közeli Pd-C rétegben megy végbe és sebessége független a tömbfázis H/Pd arányától. A felületi H kötés energiája a Pd-C fázisban lecsökken, ezért a felület borítottsága alacsony. Az eredmények értelmezését DFT (Periodic density-functional theory) számítógépes szimulációk és más technikákkal (pl. in-situ XPS) végzett párhuzamos mérések támasztják alá. A Pd-al kapott eredmények nyomán sikerült előállítani olyan Al-Fe intermetallikus analóg vegyületeket, amelyek a Pd-nál jelentősen olcsóbbak, mégis összemérhető aktivitást és szelektivitást lehet velük elérni. Az eredményeket a Nature Materials folyóiratban publikálták. Egy másik, iparilag fontos folyamat a sósav oxidálásával történő klórgyártás. Ezt az ún. Deacon-reakciót ($2 \text{HCl} + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O}$) RuO₂ katalizátoron vizsgálták. Az eredmények szerint a felület reakciókörülmények között csaknem telített klórral és ez nem távolítható el könnyen az oxigén arányának a betáplálási anyagáramban történő növelésével. A hőmérsékletfüggő *in-situ & in beam* mérések segítségével kimutatták, hogy a reakciósebesség a hőmérséklettől a felületi borítottságon keresztül függ, nem pedig a sebességi tagon keresztül. A mérési sorozat eredményeinek értelmezéséből cikket jelentettek meg a Nature Chemistry folyóiratban. A Deacon-reakciót vizsgálták RuO₂ helyett Hf, Zr, La, Y-mal adalékolt CeO₂ katalizátorok alkalmazásával is. CeO₂-alapú katalizátorok a RuO₂-hoz hasonlóan hatékonyak bizonyultak sőt, jól megválasztott Hf és Zr mennyiséggel szignifikánsan növelni lehet a CeO₂ aktivitását. Az adalékolt cérium-oxid a RuO₂-hoz képest mintegy fele költséggel állítható elő és rövid idő alatt már eljutott az ipari alkalmazhatóságig.

A nukleáris analitika terén elért további eredmények is többretűek, ahogy az alábbi felsorolás is mutatja:

A PGAA analitikai módszer továbbfejlesztése és a spektroszkópiai adatbázis tökéletesítése

A TU Braunschweiggel együttműködésben optimálták és alkalmazták a nyomdetektoros módszert Co-Re ötvözetek börtartalmának mérésére és a bór eloszlásának vizsgálatára. A PGAA módszer, valamint a komplementer szilárdtest nyomdetektoros (SSNTD) technika és az optikai mikroszkópia együttes alkalmazásával bizonyították, hogy az adalékolt bór térbeli eloszlása a bór mennyiségétől függően változik, a szemcsehatárokon feldúsul, és ezért alkalmas az anyag tulajdonságainak javítására.

A közvetlen PGAA módszer kimutatási határánál kisebb mennyiségű urán roncsolásmentes meghatározására kidolgozták a hidegneutron alapú neutronkoincidencia számlálás módszerét, amellyel µg-szinten tudtak mérni ²³⁵U-t. Ez több nagyságrenddel alacsonyabb a jelenlegi safeguards módszerekkel elérhetőnél.

A Lawrence Berkeley Laboratóriummal együttműködve folytatták a W izotópok spektroszkópiai adatainak feldolgozását. A katalitikus mérésekhez kapcsolódóan ellenőrizték a Hf, Zr, La, Y elemek spektroszkópiai adatait és adatpontosító újraméréseket is végeztek.

A nukleáris anyagok vizsgálata PGAA-val témájában nukleáris hulladékok komponenseinek pontosabb azonosításához jülichi kutatókkal közösen újabb méréseket végeztek új, $^{237}\text{NpO}_2$ és $^{242}\text{PuO}_2$ mintákon az EU FP7 ERINDA projekt keretében.

Az MTA EK Fűtőelem és Reaktoranyagok Laboratórium (FRL) munkatársaival közösen E110 és E110G cirkónium fűtőelem burkolatok magas hőmérsékletű (1200 C°) vizes/gőzös kezelését követő vizsgálatát végezték el. A kezelés során a korróziós rétegben cirkónium-hidrid is képződik. A PGAA módszerrel a fűtőelem burkolatok hidrogén tartalmát mérték és hasonlították össze. Megállapították, hogy az új típusú E110G burkolatban sokkal kevesebb a hidrogén, ami alapja lehet e burkolat engedélyeztetési folyamatának.

(n, γ) és (γ, γ') méréseket végeztek az EFNUDAT projekt keretében ^{77}Se és ^{78}Se , továbbá a ^{195}Pt és ^{196}Pt dúsított izotóppárokon a PGAA és a drezdai ELBE berendezéseken. A mérés célja olyan gamma erősségfüggvény (GEF) meghatározása volt, amely mindkét gerjesztési folyamatot egyszerre leírja, mivel az irodalomban a két módszerből meghatározott GEF nem mindig egyezik meg. Mindkét atommag párnál sikerült egy közös GEF-fel leírni a mért gamma spektrumokat, az eredményüket két cikkben adták közre.

Az Institute Laue-Langevin 46 HPGe detektoros (tíz clover és hat HPGe) EXOGAM mérőberendezésével a PFB1 neutronnyalábon egy három napos mérésorozatot végeztek (n, $\gamma \gamma \gamma$) tripla koincidenciák mérésére. A mérés célja, hogy információt nyerjenek a Pigmy (neutron bőr) rezonanciáról, további cél spin és paritás információ szerzése. A mérés során összegyűjtött 1,5 Tbájt adat feldolgozása folyamatban van.

Geológiai vizsgálatok körében számos mélytengeri szerpentin kőzetminta börtartalmának meghatározásával megállapították, hogy a mélytengeri kőzetek Cl, B, Sr, U, Sb, Rb, Cs gazdagodása a szerpentinisedés átalakulási folyamatának eredménye.

MTA EK, MTA Wigner FK, MTA-ELTE geológiai kutatócsoport, ELTE, BME együttműködésben egy speciális geológiai alkalmazás, a REGARD elnevezésű műöntomográf tesztelésére is sor került. A berendezést geológiai kőzetinhomogenitások, ill. hazai barlangokban ismeretlen járatok feltérképezésére használják. A mérések célja a kicsi, de ismert tömegabszorpció vizsgálata a műonbeütések számának alakulására. Abszorbensnek az alacsony háttérű mérőkamra falát (Fe és Pb), tovább nagy mennyiségű ólomtöglából épített vízszintes falat használtak különböző vastagságban ($0\text{-}460\text{ g/cm}^2$). A kapott kalibrációs görbe lehetővé teszi különféle tárgyak műonradiográfiás képének értelmezését.

Összefoglaló könyvfejezetben tekintették át a nagyaktivitású radioaktív hulladékok agyagkőzetekben történő végleges elhelyezésének vonatkozásait, és ugyanott beszámoltak az EU FP7 ReCosy program keretében a Bodai Aleurolitból származó kőzetmintákon végzett négyéves munkájukról is, amely a hosszú felezési idejű anionos ($^{99}\text{TcO}_4^-$, $\text{H}^{14}\text{CO}_3^-$) ill. kationos (UO_2^{2+}) komponensek szorpciós és migrációs sajátosságaival volt kapcsolatos.

Archeometriai kutatások keretében folytatták a pattintott és csiszolt kőeszközök nyersanyagainak eredetmeghatározását. A vizsgált kőeszköz nyersanyag típusok a pattintott kőeszközök esetében az obszidián, kovakőzetek, szeletai kvarcporfir, a csiszolt kőeszközök esetében zöldpala, nagynyomású metamorfit voltak. Az európai obszidiánok körét lengyelországi és romániai mintákkal bővítették. A lengyelországi mintákról megállapították, hogy egyértelműen „Kárpáti 1” típusúak, a romániai minták „Kárpáti 1” vagy „Kárpáti 2” típusúak, esetükben a méloszi eredet a PGAA-mérések alapján nem valószínűsíthető. A kutatást a K 100385 sz. OTKA pályázat, ill. a CHARISMA FP7 pályázat is támogatta. Ez utóbbi projekt keretében végzett másik esettanulmányban az olaszországi Caput Adrié területén felfedezett „Ljubljana típusú” rézkori csiszolt kőbalták nyersanyagának eredetét vizsgálták. Vizsgálataik megerősítették azt a feltevést, hogy a kőeszközök nyersanyaga közeli szlovéniai területekről származik.

A CHARISMA FP7 keretében zajló görög együttműködésben módszertani vizsgálatokat végeztek Kr.e. 16-13. sz-i műkenéi üvegeken. Az értékes leletek korrózióját, ill. lehetséges származási helyét vizsgálták. A tömbi PGAA elemösszetételt összehasonlítva a felületi PIXE és mikroszkopikus tartományra vonatkozó SEM-EDS eredményekkel meghatározták, hogy mely kémiai összetevők mennyisége változik az üvegek korróziója során.

Kr. e. 3200-ból származó korrodált egyiptomi fémgyöngyöket vizsgáltak ToF-ND, PIXE, PGAA és radiográfia módszerével. A fémgyöngyök a mérések szerint valószínűsíthetően meteorit eredetűek és bizonyíthatónak tűnik, hogy ezek a legkorábbi ismert, ember által megmunkált vastárgyak.

Bolíviában feltárt régészeti lelőhelyekről, ~Kr. u. 1200-1500-ból származó inka kerámiákat vizsgáltak. A különböző analitikai módszerekkel (PGAA, INAA, XRF) az összetétel változásán keresztül jól nyomon követhető volt a felhasznált nyersanyagok, ill. a készítési technikák változása a Késő Átmeneti Kortól (Kr.u. 1000/1200-1438) a Klasszikus Inka Korig (1438-1535).

Dinamikus Neutron Radiográfia (DNR) vizsgálatokhoz szuperkritikus vízzel hűtött reaktor fűtőelem hűtő csatornáját tervezték és építették meg. A modellberendezésben a hőmérséklet elektromos fűtéssel változtatható a meleg ágon, a hideg ág pedig hűthető, így a zárt rendszerben megvalósul a víz keringése. A beépített 16 hőmérő, négy abszolút nyomásmérő, két differenciális nyomásmérő és egy tömeg-áramlásmérő lehetővé teszi a rendszer termodinamikai állapotának a nyomon követését. A mérőeszközök által mért értékeket egy számítógép olvassa ki és tárolja 0,2 másodpercenként. A DNR segítségével nyomon követhető a víz / szuperkritikus víz átalakulás és az esetleges buborékképződés. A rendszerrel végzett mérések hozzájárulnak a szuperkritikus hűtés folyamatának megértéséhez.

Mössbauer-spektroszkópiás módszerrel vizsgálták fém-szerves (MOF) vázak kialakulását. Megállapították, hogy a szintézis komponenseinek kis módosítása más-más kialakuló szerkezethez vezethet, pl. MIL-100(Fe) helyett MIL-45(Fe) keletkezik, ha a szintéziselegyenben az 1,3,5-trikarboxi-benzoosav és FeCl₃ mellett a víz komponens helyett aceton-víz 1:1 elegyét használják. N₂O bontására, ill. ammónia redukálására használt Mg/Al/Fe réteges szerkezetű kettős hidroxidokból készített katalizátorokat vizsgáltak *in-situ* technikával. Megállapították, hogy a katalitikus hatás kialakításában az Fe-O-Fe-O-Fe láncok stabilizálódásának és méretének jelentős szerepe van. Ehhez hasonlóan, MCM-41 és SBA-15 hordozós kobalt ferrit katalizátorokat hasonlítottak össze toluol teljes oxidációjában. *In situ* mérésekkel kimutatták, hogy a hatékonyabb katalizátoron (CoFe-MCM-41) a vas nagyobb diszperzításban található és így nagyobb hányada vesz részt a redox reakciókban.

Sugárhatáskémiai vizsgálatok is több irányban folytak.

Vízben oldott szerves szennyezők nagyenergiájú sugárzással történő lebontása terén gyógyszer alapanyagok, intermedierek: 2,6-diklóranilin, acetovanillon, ketoprofen és klóramfenikol sugárzással indukált lebontását vizsgálták híg, vizes oldatban. Eredményeik azt bizonyították, hogy víz radiolízise során keletkező hidroxilgyök mindegyik vegyület esetében a benzol gyűrűt támadta meg. A keletkező köztitermék hidroxil-ciklo-hexadienil gyök, amely oxigénmentes oldatban 2,6-diklóranilin esetén anilino gyökké, acetovanillon esetében fenoxil gyökké alakul át. Oxigénnel telített oldatokban a hidroxil-ciklo-hexadienil gyökből peroxi gyök keletkezik, ez láncreakcióban bomlik és a bomlás mineralizációhoz vezet. A kis dózisoknál keletkező köztitermékek gyakran toxikusabbak, mint az alapvegyület, a dózis növelésével azonban a köztitermékek is lebomlanak, ezzel az oldat toxicitása is csökken.

Polimerek sugárállósága és sugárzásos módosítása terén gamma-sugárzással iniciált ojtással glicidil-metakrilát (GMA) monomerrel funkcionizálták a pamut-cellulózt, hidrofóbbá téve a

cellulóz felületét. Az ojtást előzetes besugárzás után (PIG) és a besugárzással egy időben (SG) is végrehajtották. A PIG módszerrel készült minták homogénebbek voltak, az SG módszerrel azonban nagyobb ojtási hatékonyságot kaptak, bár itt a homopolimer keletkezését nem sikerült elkerülniük. A reakció paraméterek (ojtási módszer, dózis, monomer koncentráció, oldószer összetétel) hatását pásztázó elektronmikroszkóppal, gravimetriásan és FTIR spektroszkóppal követték nyomon. A minták vízfelvétele csökkent, míg a peszticid molekulák adszorpciója vizes oldatukból növekedett az ojtási hatékonysággal. Az adszorpció tovább növekedett, amikor az SG módszer alkalmazásakor ciklodextrint adagoltak ojtás előtt a monomer oldathoz. A módszer továbbfejlesztésével mezőgazdasági szennyvizek tisztításához adszorbens állítható elő.

Az elektron-ion ikerrekombinációra korábban kidolgozott elméletüket sikerrel alkalmazták folyékony és szuperkritikus ammóniára; a modellt klasszikus töltéshordozó párokra is kiterjesztették.

A sugárbiztonsági kutató-fejlesztő tevékenység körében az alábbi eredmények születtek:

Gamma spektrometriai vizsgálatok keretében

végzett ^{232}U meghatározás során néhány lefoglalt, továbbá etalon uránminta is reprocesszált anyagot tartalmazónak bizonyult, amit az ezzel korreláló ^{236}U tömegspektrometriai mérések is megerősítettek. Az eddig megvizsgált paksi reaktor-üzemanyag nem tartalmaz reprocesszált anyagot. A ^{232}U izotóp a természetes uránban nem található meg, azonban minden dúsított (és szegényített) uránt tartalmazó anyagban található ^{232}U minimális, de kimutatható mennyiségben. Ez valószínűleg a dúsítómű reprocesszált anyaggal való szennyezettségére utal.

A paksi atomerőművi friss fűtőelem-kazetták dúsításának verifikálása folytatódott. Ennek keretében meghatározták az újabb szállítmányokból vett profilírozott kazetták szélső és belső üzemanyag-pálcáinak dúsítását gamma-spektrometriai módszerekkel és MCNP szimulációk segítségével.

Kiemelkedő eredmény, hogy az atomerőművi fűtőelem-kazetták Pakson számítással meghatározott és deklarált kiegészének mérésére gamma spektrometriai módszert dolgoztak ki. A kiégett fűtőelemek sugárzásának MCNP modellezésével határozták meg a különböző mélységben lévő pálcák járulékait. A mérések 3-4 %-os (1 STD) hibája alapján az eddigi kiegész-számítások 13 %-osra becsült bizonytalansága csökkenthető, ezáltal nő a biztonsági határig fennmaradó tartalék, így végső soron a kiegész ill. kampányhossz növelhető.

A BOOSTER (FP-7 EU program) keretében elvégezték az érkezett Canberra műszerek kalibrálását bio- (vér- és vizelet-) mintákkal, továbbá a CEA által kifejlesztett CdZnTe-os gamma kamera tesztelését különféle sugárforrásokkal.

A SCINTILLA (FP-7 EU program) témájában a SYMETRICA brit cég NaI(Tl) és plasztik szcintillációs detektorai teszteléséhez próbapad készült és tesztmérések történtek. Kialakították egy teszt- és oktatólaboratórium koncepcióját, amely a nukleáris és radioaktív anyagok detektálására és analizálására alkalmas detektorok fejlesztésére, tesztelésére és használatuk oktatására szolgál, és az ehhez tartozó alap infrastruktúra is elkészült.

Urán-oxid minták felületi rétegeit vizsgálták röntgen-fotoelektron és Auger-elektron spektroszkópia módszerével. Megállapították, hogy az uránium, oxigén és szén csúcsok jól azonosíthatók és a kémiai eltolódások is detektálhatók az egyes csúcsokon. Nukleáris biztosítéki célú alkalmazásokhoz a vizsgált minták körének bővítése szükséges.

Neutronkoincidenziás vizsgálatok körében A NAÜ magyar támogatói program keretében az intézetben kidolgozott PTR-32 neutron koincidenziás adatgyűjtő rendszert továbbfejlesztették. A NAÜ igényeire tekintettel korszerűsítették a készülék vezérlő és adatgyűjtő

szoftverét, elősegítendő a berendezés nukleáris biztosítéki célú nemzetközi elterjedését és használatát. Ugyanezzel a PTR-32 berendezéssel tesztelték a Passive Scrap Multiplicity Counter (PSMC) neutron detektort az ITU Nuclear Safeguards and Forensics részlegében. A mérések során hiteles hasadóanyag minták és magas dúsítási fokú fém plutónium minták sikeres vizsgálatára is sor került.

Pu-Be neutronforrások plutónium-tartalmának meghatározását a fajlagos neutronhozamok pontosabb számításával és mérésével, továbbá a töltetek radiografálásával végzett sűrűség-meghatározás alapján pontosították.

Dozimetriai anyagok és módszerek fejlesztése körében a retrospektív dozimetria terén optikailag stimulált lumineszcencia (OSL) módszerrel vizsgálták felületszerelt (SM) ellenállások dozimetriai szempontból hasznosítható tulajdonságait különböző gyártóktól származó elektronikus eszközökben. Megállapították, hogy OSL eljárással szélesebb tartományba eső utólagos dózis becslésére nyílhat mód, mint TL módszerrel. Ugyanakkor az ellenállások információvesztése az OSL technikával végzett mérések során a vártnál gyorsabbnak mutatkozott. A besugárzott ellenállások lumineszcenciájának spektrális elemzésével megállapították, hogy az irodalomban leírt kísérleti összeállítás nem ideális a célra. Megkezdtek egy, az elektronikai eszközökből származó SM ellenállások OSL elven alapuló vizsgálatán alapuló dózisbecslésre szolgáló készülék kifejlesztését, mely a terepi viszonyok között is alkalmazható.

Doziméter alapanyag vizsgálatokat is végeztek kettősen, rézzel együtt-szennyezett $\text{CaSO}_4:\text{Tm,Cu}$ ill. $\text{CaSO}_4:\text{Dy,Cu}$ doziméter alapanyagokat alkalmazva. Ezek a rézmentes anyagokétól eltérő dozimetriai jellemzőkkel (szélesebb lineáris dóziszválasz tartomány, kedvezőbb kifutási görbe, kisebb érzékenység) rendelkeznek. Szisztematikus méréssorozattal magyarázatot találtak a réz hatására: megmutatták, hogy a réz beépülése koncentrációtól függően lecsökkenti a besugárzás során keletkező szabad töltéshordozók csapdába fogódásának valószínűségét. A méréssorozat lehetővé tette a legkedvezőbb összetétel meghatározását is. Egy másik, potenciális doziméter alapanyag, a szennyezett litium-tetraborát spektrálisan felbontott TL emissziójának vizsgálata során megállapították, hogy a TL emisszió egyértelműen az adalékanyagokra (Cu^+ , Mn^{2+} , Ag^+) jellemző hullámhosszakon történik. Tehát a szennyezők lumineszcencia centrumként vesznek részt a TL folyamatban.

Technológiai doziméter fejlesztést is végeztek a Li-halogenid (LiF) tartalmú (un. „Sunna”) doziméterek körében. Ezen eszközök érzékenységi tartománya 1 – 200 kGy dózistartományba esik. Az érzékenységi tartomány alsó határát kiterjesztették az 1 kGy alatt dózisokra az emittált sugárzás infravörös tartományban történő mérésével. A felismerésre alapozva 50 – 1000 Gy besugárzási tartományban meghatározták a LiF doziméter alapanyag 1040 nm hullámhosszon adott közel lineáris optikai válaszjelét.

Tömegspektrometriai mérések kapcsán biológiai minták vizsgálatával foglalkoztak. Kis mennyiségű radioaktív anyag-tartalom gyors és pontos meghatározása fontos lehet esetleges terrorcselekményeket, vagy nukleáris baleseteket követően a sérültek belső szennyezettségének meghatározásához. Ehhez kapcsolódóan vér és vizelet mintákban hosszú felezési idejű aktinidák (elsősorban urán) mennyiségének LA-ICP-MS módszerrel történő gyors meghatározási eljárását dolgozták ki és kalibrálták a minta mátrix-hatásának figyelembe vételével. Az urán alsó kimutathatósági határa vérben 4,2 pikogramnak, vizeletben 8,5 pikogramnak adódott. A lézerablációs elemzések mellett egy kémiai elválasztásos, folyadékokat alkalmazó pontosabb és érzékenyebb analitikai módszert is kidolgoztak a biológiai minták tömegspektrometriai elemzéseikhez.

Hasonló célból lézer indukált plazma spektrometriás (LIBS) módszert is fejlesztettek biológiai folyadékok elemzéséhez, amely módszert alkalmazva a cézium mennyisége

pontosan meghatározható egy cseppnyi vérből, vagy vizeletből. Sor került egy hordozható LIBS berendezés beszerzésére is. A célkitűzések szerint a készüléket alkalmassá teszik arra, hogy megfeleljen az Országos Atomenergia Hivatal és a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség elvárásainak és igényeinek, azaz legyen alkalmazható hatósági elemzések kiegészítéseként terepi mérésekre, nukleáris anyagok helyszíni azonosítására, urán-tartalmú minták dúsítási fokának meghatározására.

A felületkémi és katalízis kutatások terén elért főbb kutatási eredmények

Hidrogén előállítás és tisztítással kapcsolatos kutatások

A hazai nagy CO₂ tartalmú metán kutak, ill. a biogáz hasznosításának egyik lehetősége a metán katalitikus száraz reformálása ($\text{CO}_2 + \text{CH}_4 = 2 \text{CO} + 2 \text{H}_2$). A folyamatban aktív és széndepozitum képződéssel szemben ellenálló katalizátor fejlesztésével kapcsolatos kutatások során megállapították, hogy az egyfémű Ni/MgAl₂O₄ minták katalitikus tulajdonságai függetlenek a preparálási módszertől, ha a nikkeltartalmuk és a részecskeméretük megegyezik. A MgAl₂O₄ hordozós, szol módszerrel kialakított kétfémű NiAu fázis a magas hőmérsékletű előkezelések és katalitikus folyamat során átstrukturálódik. A hozzáadott arany negatív hatással volt a katalizátor stabilitására és a szénlerakódás eltávolíthatóságára.

A N₂O bontásában és az N₂O + CH₄ reakcióban extra aktivitású, korábbiakban kifejlesztett többfunkciós M/Ga/H-ZSM-5 (M: Fe, Co, Ni, Mo, Ru, Pd, Ag, Ir, Pt, Au) katalizátorok két csoportra oszthatók: a metán jelenléte Pt és Pd esetén növelte a N₂O konverziót, a többi fém esetén nem volt hatása. A N₂O eltávolítása a szén-monoxidot is tartalmazó biogáz hasznosítása esetén is fontos lehet, ezért a katalizátorrendszer alkalmazhatóságát megvizsgálták N₂O + CH₄ + CO elegyben is. Megállapították, hogy a 0,5 % CO tartalom a Pt reverzibilis dezaktiválódását okozza, Fe esetén csökkenti az N₂O + CH₄ reakciót. Ez azzal magyarázható, hogy a Pt esetén a versengő N₂O + CH₄ és CO + CH₄ reakciók különböző aktív centrumokon mennek végbe.

A hidrogén tüzelőanyagcellák táplálására szolgáló hidrogénből az elektródkatalizátort mérgező szén-monoxid eltávolítására a katalitikus preferenciális oxidáció (PROX) a legígéretesebb folyamat. Kétfémű PtSn katalizátorok vizsgálatában kimutatták, hogy az oxigénnel, majd hidrogénnel végzett kezelés hatására nagyobb a Pt koncentráció a felületközelben, mint a csak hidrogénben történt kezelés után, s ez nagyobb CO konverziót eredményezett a PROX reakcióban. *In situ* XPS vizsgálatok alapján az alkalmazott körülmények között fémű Pt és Pt₃Sn ill. Sn-oxid jelenléte, víz és felületi hidroxidok feldúsulása jellemző a PROX folyamatban.

Nemesfém mentes oxidkatalizátorokat is vizsgáltak a PROX folyamatban. E célból oxálsavas lecsapással és azt követő hőmérséklet programozott oxidációval állítottak elő jelentős fajlagos felülettel (>50 m²/g, MnO_x>Mn_mCoO_x>CoO_x) rendelkező Mn- és Co-oxid valamint mangánnal promoveált kobalt-oxid (Mn/Co=5/95 ill. 12/88 atomarányú) mintákat. XRD vizsgálatok szerint a MnO_x kb. 25% Mn₃O₄ mellett amorf fázist, a CoO_x jól kristályosodott Co₃O₄-t, a vegyes oxid mangánnal szubsztituált Co₃O₄ fázist tartalmazott. Figyelemreméltó a vegyes oxid minta a CoO_x-ét jelentősen meghaladó stabilitása a szintereléssel szemben. TPR-TPO vizsgálatok kimutatták, hogy a Mn beépülés módosította a Co₃O₄ redox tulajdonságait. A PROX reakcióban a katalitikus tulajdonságok (aktivitás, CO oxidációs szelektivitás) az MnO_x<Co₃O₄<Mn_mCo_{3-m}O₄ sorrendben javultak ugyanakkor a folyamat során a katalizátorok különböző mértékben redukálódtak, ami a CO oxidációs aktivitást csökkentette. Reoxidációval a minták többé-kevésbé regenerálhatók. A Co₃O₄ redukciója hatására az ismételt hőmérséklet programozott PROX ciklusokban egyre növekszik a metánképzési hajlam, ami a CO oxidációnál kedvezőtlenebb. Ez a hajlam nem lépett fel a többi mintán. A katalizátorminták fajlagos felületét is figyelembe véve a vegyes oxid mintán

szinergikus hatást tapasztaltak, ami feltételezhetően a vegyes oxidban az oxigén kötési energiája kedvező módosulásának következménye.

Alternatív energiával kapcsolatos kutatások

Triglicerideket és zsírsavakat tartalmazó növényi olajokból történő biodízel előállításához kapcsolódóan olajsav dekarboxilezését vizsgálták hidrogénező kezelés során szulfidált alumínium-oxid hordozós NiMo (P tartalommal) és NiW katalizátorokon. Speciális mikroanalitikai reaktort hoztak létre az aktivitás és szelektivitás vizsgálatára, valamint a folyamat mechanizmusának és a katalizátorból történő kénkioldódás ^{14}C - és ^{35}S -nyomjelzéssel történő vizsgálatára. A kifejlesztett katalitikus berendezés és mérőmódszer alkalmas különböző katalizátorok növényi olajok hidrogénes kezelésében történő összehasonlító vizsgálatára.

Környezetvédelmi katalitikus technológiákkal kapcsolatos kutatások

A katalitikus nedves oxidáció szükséges és elégséges mértékét határozták meg szennyvíztisztításban, amely biztosítja a kezelt szennyvíz biodegradálhatóságát a szerves széntartalom teljes eltávolítása nélkül. Modell vegyületek vizes oldatai katalitikus oxidációjának hőmérséklete 180°C -ról szobahőmérsékletre volt csökkenthető besugárzás alkalmazásával. Monolit katalizátorokat minősítettek valós szennyvizek nedves oxidációjában.

Üzemanyagok kéntelenítésével kapcsolatban tiofén modell vegyület alumínium-oxid hordozós Ni, Mo és NiMo katalizátorokon végzett hidrodészulfurálásában (HDS) ^{35}S -nyomjelzéssel vizsgálatokkal bizonyították, hogy a HDS folyamattal egyidejűleg a tiofén reciklizációja is megtörténik. Butadién és a katalizátor kéntartalma kölcsönhatásának eredményeképpen, heterociklizáció révén keletkezik a tiofén. A katalizátorok heterociklizációs aktivitásának sorrendje hasonló a tiofén hidrodészulfurálása során tapasztaltnak. A reakció konverziójának növekedése az aktiválási energia növekedésével párosul. Ebből következik, hogy a katalizátorok aktív helyei és a reagáló molekula közötti kisebb aktivitású katalitikus helyek számának növekedése túlkompenzálja a katalizátor és a reagáló molekula közötti gyengébb kölcsönhatásból következő sebességsökkenést.

Nagyszzelektivitású katalitikus folyamatokkal kapcsolatos kutatások

Kétfémes aranyalapú katalizátorok szelektív oxidációs alkalmazhatóságát feltérképező kutatások keretében, amelyet glükóz és benzil alkohol modell vegyületek és O_2 , mint reaktáns alkalmazásával végeznek, folytatták a hordozós AuAg rendszer tanulmányozását. Ezüst nitrát vizes oldatban, stabilizátor jelenlétében végzett redukciójával előállított Ag szolban HAuCl_4 redukciójával ötvözet jellegű kétfémes részecskék jöttek létre az UV-vis, HRTEM és XPS vizsgálatok szerint. Különböző Ag/Au atomarányú kétfémes szolokat adszorbeáltak SiO_2 hordozón. A szerves maradványok eltávolítását szolgáló kalcinálás hatására Au- Ag_2O szerkezet keletkezett, amint az XPS eredmények mutatták. Optimalizált körülmények között mind a kétfémes, mind az analóg egyfémes minták 100%-os szelektivitással képeztek glükonsavat glükóz szelektív oxidációjában. Szinergikus hatás volt tapasztalható az Ag/Au $\leq 0,5$ összetételek esetén. Fordított arányosságot tapasztaltak az aktivitás és az XPS-szel meghatározott felületközeli Ag/Au atomarányval. Az Ag_2O jelenléte az Au mellett vagy felületén valószínűleg megnöveli az O_2 adszorpciót ezzel növelve az aktivitást, azonban a glükóz adszorpciójához szükséges kiterjedt Au felületek számát csökkenti, ami aktivitáscsökkenést okoz.

Megkezdődött az AuCu kétfémes katalizátorok szelektív oxidációban történő vizsgálatához különböző szerkezetű kétfémes minták előállítása. Ötvözet és mag/héj szerkezetű AuCu nanorészecskéket állítottak elő vizes szolokban és adszorbeáltak Al_2O_3 and SiO_2 hordozókon.

A szolokat UV-vis spektroszkópiával és TEM-mel jellemezték, a hordozós mintákat nagyfeloldású TEM-mel is tanulmányozták.

Tanulmányozták az aszimmetrikus heterogén katalitikus hidrogénezést, az aszimmetrikus indukció katalitikus és molekuláris feltételeit heterogén katalitikus hidrogénezésekben. 2- és 3-metilciklohexanon (S)-prolin redukív alkilezésével végzett kinetikus rezolválását és 3,5-dimetil 2-ciklohexénon aszimmetrikus hidrogénezését vizsgálták. Megállapították, hogy a 2-metil származék esetében tapasztalható számottevő enantioszelektivitás, de ez is elmarad a trimetilciklohexanonéhoz képest. A ciklohexénon származék hidrogénezése egy sztereoisomert (mezo) eredményez.

Reaktorbiztonsággal kapcsolatos korróziós kutatások

Cirkónium és víz normális üzemi hőmérséklet feletti (> 900 °C) reakciója a nukleáris fűtőelemek burkolatának felgyorsult degradációját eredményezi. ATWS típusú balesetek esetén megnövekedhet a nyomás (pl. 150 bar alakulhat ki egy órán át is). Egy hőmérséklet és nyomásszabályozóval ellátott speciális autoklávot tartalmazó kísérleti berendezést építettek az oxidációs sebesség nyomásfüggésének tanulmányozására különböző Zr alapú burkolatanyagokon 1000°C-ig és 150 bar nyomásig. Zircaloy-4 és Zr-1%Nb (E110) mintákon kapott kezdeti eredmények a 30 perc alatt mért átlagos oxidációs sebesség exponenciális nyomásfüggését mutatták. Az oxidációs sebesség E110 mintán tapasztalt nagy szórását inkubációs periódus jelenlétével magyarázták, amelynek időtartama statisztikusan változik.

b) Tudomány és társadalom

Az ELTE-n rendezett „80 éves a neutron” című megemlékezésen, valamint az MTA Tudomány Ünnepe rendezvénysorozat keretében laborlátogatással egybekötött összefoglaló előadást tartottak a PGAA analitika alkalmazásairól.

Az egykori Központi Fizikai Kutatóintézetbe (KFKI) látogatott Farkas Erika „A hely” új sorozatában március 19-én (MR1 Kossuth rádió). A csillebérci kutatóparkban először a kutatóreaktort és a hozzá tartozó különleges nukleáris analitikai munkákat mutatták be. A felvétel során készített kép és hanganyag a

http://www.youtube.com/watch?feature=player_embedded&v=SQYa6HL7KcA
címen tekinthető meg.

Április 6-án a MOL Downstream portfólió kutatás-fejlesztés vezetői látogatást tettek az intézetben. Az intézet munkatársai előadásokon ismertették az esetleges közös érdeklődésre számot tartó, rendelkezésre álló módszereket és eljárásokat. Az előadásokat konzultáció követte.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A *nukleáris analitika terén* a hazai kapcsolatok között kiemelkedően fontosak a Magyar Nemzeti Múzeummal, a Budapesti Neutron Centrum tagintézményeivel (Wigner FK RMI és SzFI) és kutatócsoportjaival, a MTA CSFK, az ATOMKI, valamint az ELTE Közzettan-Geokémiai Tanszék munkatársaival fennálló együttműködések. A nagyaktivitású nukleáris hulladékok elhelyezése geológiai vonatkozásaiban a Mecsekérc Zrt-vel fennálló kapcsolatok fontosak.

Nemzetközi kapcsolataik keretében számos együttműködés folyik a DG JRC IRMM (Belgium), az FZ Jülich, a HZ Drezda, a LBNL (USA), a Károly Egyetem (Csehország), a NAÜ nukleáris adatok és fizika osztálya, a Fritz-Haber Intézet és a TU München FRM-II, valamint a ljubljani Kemijski Institut munkatársaival.

Létrejött egy TANDEM elnevezésű együttműködési szerződés a TU München, az FZ Jülich, a LBNL és az MTA EK között a nukleáris hulladékok karakterizálása témakörében.

A sugárhatáskémia területén dolgozó kutatók oktatási tevékenységet is végeznek a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán, a Szegedi Egyetemen, az Óbudai Egyetemen, és a Pannon Egyetemen, anyagtudomány, környezetvédelem, és víztisztítás témakörökben. Hazai kapcsolataik a Bay Zoltán ATI-val, PEMŰ-vel és a Corvinus Egyetemmel épültek ki.

Nemzetközi kapcsolataik elsősorban a pályázati együttműködésekre épülnek (EUREKA, Magyar-Indiai Tét, Nemzetközi Atomenergia Ügynökség).

A sugárbiztonság területén elsősorban a Nemzetközi Atomenergia Ügynökséggel (NAÜ) vannak kapcsolatban. Az intézet részt vesz az OAH ún. nemzeti támogatási programjában, mely nukleáris analitikai módszerek fejlesztését célozza a NAÜ részére a PTR-32 neutron koincidenciás adatgyűjtő rendszer továbbfejlesztése („A1667: Development and Evaluation of a Multiplicity Spectrometer Prototype”), valamint a hordozható lézer indukált plazma spektrométer (LIBS, Laser Induced Breakdown Spectroscopy) nukleáris biztosítéki és nukleáris törvényszéki analitikai célokra történő használata („A1597: Support for Novel Technologies”) témák keretében.

Két EU-s Joint Research Centre-vel (JRC) is van együttműködésük. Az ITU (Institute for Transuranium Elements) megbízásából tartottak két hetes nukleáris törvényszéki témájú tanfolyamot, valamint az intézeti PTR-32 neutronos adatgyűjtő rendszerrel tesztelték az ITU-s a Passive Scrap Multiplicity Counter (PSMC) neutron detektort. A másik, Ispra-i kutatóintézetben ugyancsak a PTR-32 rendszer tesztelését végezték el.

Dozimetriai fejlesztési témákon vannak kétoldalú együttműködések az amerikai Pacific Northwest National Laboratories, a Horvát Akadémia „Ruder Boskovic” intézetével, a Szerb Akadémia Vinca Nukleáris Kutatóintézetével és az Ukrán Akadémia Felületkémiai Intézetének munkatársaival.

A tömegspektrometriai csoport a francia „Triskem International” céggel dolgozik együtt nukleáris analitikai fejlesztési témákon.

A felületkémia és katalízis terén a hazai kapcsolatok közül az oktatási tevékenység említendő ki, amely a Budapest Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmel alakult ki, ahol az intézet kutatói rendszeres előadásokat, ill. laborgyakorlatokat is tartanak, ill. BSc vegyészmérnök szakdolgozat témavezetését biztosítják. Parafált, ill. informális kutatási együttműködésekben is részt vesznek, az előbbieket a Pannon Egyetemmel, míg az utóbbiakat az MTA TTK MFA, az MTA Wigner kutatóközpont, az MTA TTK AKI kutatóival közösen végzik.

Nemzetközi kétoldalú együttműködések svájci (École polytechnique fédérale de Lausanne, EPFL), osztrák (Institute of Materials Chemistry, Vienna University of Technology), belga (Université Libre de Bruxelles, ULB) valamint olasz (CNR, Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturali, CNR, Palermo) kutatókkal alakultak ki.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA K 100385, „Kárpát-medencében fellelt kőeszközök nyersanyagainak roncsolásmentes eredetvizsgálata”: A pályázat fő célkitűzése pattintott- és csiszolt kőeszköz leletek nyersanyagainak (obszidiánok, kovaközetek, stb.) eredetvizsgálata. A kutatás összehasonlító geológiai minta gyűjtését (terepi munka), főként PGAA- és más, lehetőleg roncsolás mentes anyagvizsgálatokat (Optikai Mikroszkóp, SEM-EDS, XRF, INAA) foglal magába. Magyarország és a szomszédos országok, valamint Lengyelország és Olaszország területén terveznek mintákat gyűjteni főleg a már meglévő tudományos együttműködési kapcsolatok (CHARISMA, TÉT) alapján. A kapott eredményeket egy internetes, nyílt hozzáférésű kőeszköz nyersanyag adatbázis indításához is fel kívánják használni.

Magyar–Marokkói TÉT: A projekt keretében az intézet kutatói a hazai tapasztalatok átadásával a Marokkóban létesült kutatóreaktor komplexumában kialakítandó PGAA laboratórium kialakítását segítik elő. A továbbiakban közös kutatási projektek indítását is tervezik.

OTKA NK 105802, „Gyógyszermaradványok degradációja vizes oldatban, ionizáló sugárzással előállított hidroxil gyökökkel”: A pályázat célja a vízben oldott szerves szennyeződések ionizáló sugárzásos lebontása, ill. a lebomlás mechanizmusának leírása. Az ú.n. „nagyhatékonyságú oxidációs eljárások” (AOP) egyik fajtája az ionizáló sugárzásos technika, amely lehetőséget ad a gyökös reakciók követésére (gyökkoncentráció időbeli változásának mérésére), kinetikai együtthatók meghatározására és a mechanizmus felderítésére. Az eredmények általánosíthatók az egyéb AOP technológiákra is.

TET_09_IN_DST - PIEZOFIB, „Flexibilis szál-alapú nanogenerátorok fejlesztése, jellemzése és modellezése”: A pályázat célja piezoelektromos jellemzőkkel rendelkező szálak szerkezetek kidolgozása, melyekben a „nemszőtt” (vlies) struktúrát képező szálak felületén ZnO nanoszálak találhatók. A nemszőtt szálakat az EK kutatói sugárzással iniciált ojtással módosítják, ezzel göcöket képeznek, amelyekre a BAY ATI (a pályázat külső részt vevője) munkatársai elektrokémiai eljárással ZnO nanoszálakat alakítanak ki.

OTKA 101854, (2012–2016), „Aerob szelektív oxidáció aranytartalmú kétfémes katalizátorokon”: Hordozós Au-M (M: Ag, Cu, Ru, Ir) kétfémes katalizátorokat fejlesztenek, vizsgálnak és hasonlítanak össze hidroxil-aldehidek, alkoholok és szénhidrogének szelektív oxidációjára, glükóz, benzil-alkohol és toluol, mint modell vegyületek alkalmazásával. A preparálási módszer és a két fém atomarányának hatását vizsgálják a katalizátor szerkezetére, aktivitására, szelektivitására és stabilitására. A hordozó sav-bázis tulajdonságainak hatását is tanulmányozzák hatékony új típusú többfunkciós katalizátor kialakításának reményében.

ERACHEMISTRY, OTKA NN 107170, 2012–2015, „Száras reformálás: út az elemi lépésektől a hatékony katalizátorig”: A kutatás célja új típusú nagy aktivitású és stabilitású Pt, Ni katalizátorok fejlesztése a száras reformálás ($\text{CO}_2 + \text{CH}_4 = 2 \text{CO} + 2 \text{H}_2$) céljára. Ennek érdekében a száras reformálás és a mellékfolyamatai, különös tekintettel a katalizátort mérgező szénképződésre, elemi lépéseinek és a katalizátorszerkezettel való összefüggéseinek feltárására törekcsenek. A kutatások a Müncheni és a Bécsi Műszaki Egyetemmel együttműködésben folynak.

Az Országos Atomenergia Hivatal „Műszaki Megalapozó Tevékenység” pályázatai közül hat projektet nyertek.

Osztrák–magyar Tudományos és Oktatási Kooperációs Akció Alapítvány, 84öu5, 2012–2013, „Oxid indukált promóciós hatás CO oxidációban nemesfém katalizátorokon”: Oxidokkal

promoveált arany katalizátorok katalitikus aktivitása és az aktív Au-oxid határfelület szerkezete összefüggéseinek megismerése a kutatás célja.

Az EU FP-7 *Scintilla* „Scintillation detectors and new techniques for nuclear security” projekt konzorciuma is pályázatot nyert, melyben az intézet is résztvevő.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Teschner D, Novell-Leruth G, Farra R, Knop-Gericke A, Schlögl R, Szentmiklósi L, et al. (11): In situ surface coverage analysis of RuO₂-catalysed HCl oxidation reveals the entropic origin of compensation in heterogeneous catalysis. *Nature Chemistry*, 4: 739-745 (2012)
2. Armbrüster M, Kovnir K, Friedrich M, Teschner D, Wowsnick G, Hahne M, Gille P, Szentmiklósi L, et al. (14): Al₁₃Fe₄ as a low-cost alternative for palladium in heterogeneous hydrogenation. *Nature Materials*, 11: 690-693 (2012)
3. Birsa Celic T, Rangus M, Lázár K, Kaucic V, Zabukovec Logar N: Spectroscopic evidence for the structure directing role of the solvent in the synthesis of two iron carboxylates. *Angewandte Chemie International Edition*, 51: 12490-12494 (2012)
4. Guczi L, Erdőhelyi A (szerk.): *Catalysis for Alternative Energy Generation*. New York, Springer, 536 pp. (2012)
5. Hosseini AM, Tungler A, Schay Z, Szabó S, Kristóf J, Széles É, Szentmiklósi L: Comparison of precious metal oxide/titanium monolith catalysts in wet oxidation of wastewaters. *Applied Catalysis B: Environmental*, 127: 99-104 (2012)
6. Illés E, Takács E, Dombi A, Gajda-Schranz K, Gonter K, Wojnárovits L: Radiation induced degradation of ketoprofen in dilute aqueous solution. *Radiation Physics and Chemistry*, 81: 1479-1483 (2012)
7. Almási I, Nguyen CT, Zsigrai J, Lakosi L, Hlavathy Z, P. Nagy P, Buglyó N: Verification of 235U enrichment of fresh VVER-440 fuel assemblies. *Appl. Radiat. Isot.*, 70: 2403-2408 (2012)

**AZ MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2012-BEN**

Főbb mutatók 2012-ben

MTA Energiatudományi Kutatóközpont*

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>				
Átlagléttség ¹ :	261	Ebből kutató ² :	89	
PhD, kandidátus:	61	MTA doktora:10	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				39
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>				
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				111
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				106
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				9
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				3
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				71
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				64
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:		0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:		5
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>				
Összesített impaktfaktor ⁷ :	189,663	Összes független hivatkozás száma:		1634
Összes hivatkozás száma ⁸ :	1996			
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN</u>				
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:		0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>				
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :		0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>				
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :				76
		poszterek száma:		34
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	4			
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>				
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :				15
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):		5
Diplomamunka (MSc):	7	PhD:		16
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>				
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		1076 621	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	12	Teljes saját bevétel:	1248 372	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:				9
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	70 287	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:				11
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	28 210	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:				102
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	144 939	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:				21
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	136 154	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		939 069	E Ft	

* A kutatóközponti adatok hitelesek, ellenőrzöttek; a kutatóközponton belüli intézeti adatok tájékoztató jellegűek

Pénzügyi adatok 2012-ben

MTA Energiatudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	1076 621	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	1248 372	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	70 287	E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	28 210	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	144 939	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	136 154	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	864 558	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	30 485	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	43 256	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	770	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA EK Atomenergia-kutató Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	188	Ebből kutató ² :	41
PhD, kandidátus:	30	MTA doktora:	5
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			1
			14

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			45
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			44
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			5
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			27
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			25
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	39,73	Összes független hivatkozás száma (2011):	377
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			483

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			47
		poszterek száma:	13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	3		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			7
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	5

Főbb mutatók 2012-ben

MTA EK Izotópkutató Intézet (2013-tól EKBI)

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	73	Ebből kutató ² :	48
PhD, kandidátus:	31	MTA doktora:	5
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			25

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			68
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			64
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			4
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			3
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			46
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			41
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	160,49	Összes független hivatkozás száma (2011):	1265
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			1521

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			29
		posztterek száma:	21
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			8
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	11

MTA RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET

1053 Budapest, Reáltanoda u. 13-15.; 1364 Budapest, Pf. 127

telefon: (1) 483 8302; fax: (1) 483 8333

e-mail: palfy.peter.pal@renyi.mta.hu; honlap: <http://www.renyi.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet alapvető feladata, hogy az elméleti matematika területén világszínvonalú kutatásokat folytasson. Az intézet a nemzetközi matematikai élet jelentős központja, munkatársai kiváló munkájának köszönhetően 2012-ben tovább növelte hírnevét itthon és külföldön egyaránt. Kiemelkedik az intézet professor emeritusa által elnyert Abel-díj, a matematika tudományának legjelentősebb nemzetközi díja. Az Európai Kutatási Tanács (ERC) ötéves támogatásával egy újabb projekt indult 2012-ben, és egy további pedig nyert az ebben az évben meghirdetett újabb fordulóban. Ezzel a 2013-ban induló projekttel az intézet immár a negyedik ERC Advanced Grant befogadó intézménye. Az intézet nemzetközi megbecsültségét az is jelzi, hogy 2012-ben a Rényi Intézet rendezhette meg az európai matematikai intézetek konzultatív testületének (ERCOM) szokásos éves tanácskozását. Az is említést érdemel, hogy az American Institute of Mathematics egyik konferenciájának helyszínéül a Rényi Intézetet választotta.

Az intézet tudományos feladatai elsősorban a felfedező kutatás területére koncentrálnak, de néhány alkalmazott matematikai témára is jelentős erőket fordítanak. Ezek a témák elsősorban a bioinformatika és a kriptográfia, de a matematikai statisztika terén végzett alkalmazási tevékenység is számottevő. A kutatás kilenc tudományos osztály keretei között folyik. A Lendület program támogatásával létrejött három kutatócsoport (kriptográfia 2009-től, alacsony dimenziós topológia 2010-től, csoportelmélet 2012-től) önálló tudományos tematikával a szakmailag releváns tudományos osztályon belül működik, csakúgy mint az ERC által támogatott kutatócsoportok (számelmélet 2008-től, geometria 2010-től, topológia 2012-től). Az intézet kutatási tematikáit folyamatosan a matematika fejlődése által felvetett legújabb kérdésekhez igazítják.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Algebra osztály

Egy nagy érdeklődést kiváltott cikkben bevezették az invariáns véletlen részcsoport fogalmát. A témából ennek nyomán neves kutatók workshopot szerveztek Izraelben.

Rámutattak a Gauss-lemma kiemelt szerepére az értékelélméletben. Eredményükből következik Jaffard és Ohm nevezetes tétele, amely szerint bármely hálószerűen rendezett Abel-csoport felfogható egy alkalmas Bezout-gyűrű oszthatósági elméletéként.

Leírták az erős felső háromszögmátrix-gyűrűk automorfizmus-csoportját a bennük szereplő gyűrűk és bimodulusok automorfizmus-csoportjainak a segítségével. Ennek következményeként megmutatták, hogy a szemiperfekt gyűrűk idempotenseinek az elmélete megfelelően átvihető ezekre a gyűrűkre (dél-afrikai–magyar TÉT együttműködés keretében).

A véges csoportok polinom-invariánsainak fokszám-korlátjára vonatkozó Noether-szám Abel-csoportok esetén megegyezik az additív számelméleti Davenport-konstanssal. Az általánosított Davenport-konstans mintájára bevezetett általánosított Noether-számra kiterjesztettek több additív számelméleti eredményt, például direkt szorzat általánosított

Noether-számát alulról becsülték a tényezők megfelelő jellemzőjével. A vizsgálatok egyik konklúziója, hogy Abel-csoport exponensének a nemkommutatív esetben egy olyan mennyiség felel meg, amelynek lényeges szerepe van redukzív algebrai csoportok konstruktív invariáns elméletében.

Mátrixok szubdiszkriminánsainak invariáns elméleti jellemzését adták, és ezt alkalmazták valós szimmetrikus mátrixok esetén a szubdiszkrimináns négyzetösszeg előállítására.

Jelentős eredményeket nyertek féllegyszerű lokálisan szimmetrikus terek Betti-számainak, csavart torziójának és egyéb spektrális invariánsainak az aszimptotikus viselkedéséről.

Az úgynevezett nem relatív prím $k(GV)$ probléma extraspeciális részével kapcsolatosan még élesebb felső becsléseket sikerült adni a GV szemidirekt szorzat $k(GV)$ konjugáltsági osztályainak számára, ahol V teljesen reducibilis véges hű G -modulus valamely G véges csoportra.

Nem ciklikus G véges csoport esetén legyen $\gamma(G)$ a legkisebb olyan k szám, amelyre G előáll k darab valódi részcsoportha összes konjugáltjának uniójaként. Explicit korlátokat és formulákat adtak $\gamma(G)$ -re abban az esetben, amikor G lineáris csoport. Belátták, hogy $\gamma(G)$ a G csoport dimenziójának lineáris függvénye.

Grandis féllegzakt kategóriáit általánosítva zérusobjektum nélküli kategóriákra megadtak egy új egzaktági fogalmat, megmutatták, hogy ennek segítségével kifejezhetők az általános radikálemélet alapfogalmai. Ez a megközelítés rámutat arra, hogy a radikál és a féllegyszerű osztályok megfelelnek a lezárási operátorokhoz tartozó sűrű, ill. zárt morfizmusok osztályainak, más szóval a lezárási operátorok felfoghatók radikálemélettekként.

A kommutatív félcsoportrendeket új szempontból vizsgálták. Sikerült ezeket a félcsoportokat a négyzet-egyszerűsíthető elemek félcsoportjának félháló-felbontásai segítségével jellemezniük. Megmutatták, hogy egy kommutatív rend összes hanyadosfélcsoportha előáll ugyanazon tenzorszorzat-félcsoportha homomorf képeiként.

Több természetes csoportosztályról megmutatták, hogy azokban nincs endoprimal csoport (észt–magyar MTA együttműködés keretében).

Algebrai geometria és differenciáلتopológia osztály

Belátták, hogy a klasszikus Durfee-sejtés (egy teljes metszet felületsingularitás szignatúrájára vonatkozó, 40 éves sejtés) nem igaz. Egy új egyenlőtlenséget javasoltak, amit homogén esetben beláttak.

Több cikkben a Hodge-spektrum félfoltyonosságát bizonyították topologikus módszerekkel.

A peremes sokaságok Morse-elméletét fejlesztették tovább, és ezek, valamint algebrai mütét formulák felhasználásával bizonyították Seifert-formák létezését és kulcsfontosságú tulajdonságait.

Bebizonyították a rácspont homológia redukciós tételét, ami ezek számolásában és strukturális megértésében igen jelentős előrehaladás.

Olyan különleges tulajdonságokkal rendelkező 3-sokaságokat kerestek, amelyek a nem-izolált felület szingularitások Milnor-fibrumainak határaiként jelennek meg.

Kidolgozták az Ehrhart-elmélet egy alkalmazását, amely segített a felületsingularitások csomójához tartozó Seiberg–Witten-invariáns kiszámításában, kapcsolatot teremtve ezzel különböző invariánsok között.

Érdekes összefüggéseket találtak alacsony dimenziós sokaságokon konstruált leképezések 4-szinguláris halmazai között.

Dualitástételeket bizonyítottak olyan algebrai tóruszok Galois-kohomológiájára, amelyek p -adikus testek feletti görbék függvényteste felett definiáltak. Kiderült, hogy csakúgy, mint a klasszikus esetben algebrai számtestek felett, itt is bevezethető egy Tate–Safarevics-csoport, amely véges, és duálisa az ún. duális tórusz Tate–Safarevics-csoportjának.

Élesítették S. Saito és K. Sato egy, az *Annals of Mathematics*-ban megjelent, Bloch–Ogus-típusú komplexusokra vonatkozó sejtését, amely így a már bizonyított esetekben erősebb formában is igaz.

Folytatták Heegaard–Floer-homológiák kombinatorikus leírásának kutatását. Eredményeket értek el a rácsponthomológiákkal való kapcsolat feltárásában: találtak egy spektrális sorozatot, mely a rácsponthomológiából a Heegaard–Floer-homológiába tart. Mivel ez a sorozat bizonyos esetekben összeomlik, jó néhány esetben a két elmélet izomorfiáját kapták. Megmutatták, hogy egy szimplektikus feloldás kicserélése a szingularitás egy simításával szimplektikus operáció.

Shalev egy tételét nagymértékben kiterjesztő eredményeket láttak be véges egyszerű csoportok expanziójáról.

Lubotzky egy modellelméleti eszközökkel bizonyított véges egyszerű csoportok szorzatfelbontásaira vonatkozó tételét lényegesen általánosították, az új bizonyítás modellelmélet helyett lényegesen egyszerűbb csoportelméleti eszközöket használ.

Liebeck, MacPherson és Tent pár éve azt a meglepő eredményt látták be, hogy viszonylag jól leírhatók azon primitív permutációcsoportok, ahol a pályagráfok átmérői korlátosak. A motiváció és az eszköztár itt is nagyrészt modellelméleti. Csoportelméleti eszközökkel részben jóval általánosabb, részben pontosabb eredményeket sikerült elérniük.

Algebrai logika osztály

Elsőrendű logikában a speciális relativisztikus dinamikára megadtak axiómarendszereket, melyek mindegyike néhány egyszerű és geometriai axiómából áll. Az axiómarendszerek mindegyike megengedi fénynél gyorsabb, tömeggel bíró részecskék létezését és ütközését. Mindegyik axiómarendszerből az következik, hogy a fénynél gyorsabb részecskék relativisztikus tömege és impulzusa a sebesség növekedésével csökken. Kibővítették az axiómarendszereket úgy, hogy fénynél gyorsabb részecskék létezése független az új axiómarendszerrel, azaz ha az új axiómarendszerhez hozzávesszük azt az állítást, hogy vannak fénynél gyorsabb részecskék, teljes elméletet kapunk, és ugyanez vonatkozik arra az állításra is, hogy nincsenek fénynél gyorsabb részecskék. Ez a szituáció analóg azzal, ahogy a geometriában a párhuzamossági axióma független a többi euklidészi axiómától.

Megmutatták, hogy ha vannak fénynél gyorsabb részecskék, akkor már a speciális relativitáselmélet keretei között is lehet a téridő sajátosságait kihasználva olyan kísérletet tervezni, ami eldönt egy nem Turing-kiszámítható problémát (például a halmazelmélet ZFC axiómarendszerének konzisztenciáját). Továbbá azt is megmutatták, hogy ilyen kísérlet csak akkor létezik a speciális relativitáselmélet keretei között, ha vannak fénynél gyorsabb részecskék.

Minden 2-nél nagyobb dimenzió esetén a racionális számtest felett megadták a speciális relativitáselmélet egy olyan modelljét, amelyben tetszőleges irányban, tetszőleges fénynél kisebb sebességhez tetszőlegesen közeli sebességgel mozoghat inerciális megfigyelő. Ez az eredmény azért meglepő, mert három dimenzió esetén nem lehet olyan modellt adni a racionális számtest felett, ahol bármely fénynél kisebb sebességgel lehet mozogni.

Bizonyították, hogy 4 dimenzió esetén nemcsak olyan testek felett lehet minden fénysebességnél kisebb sebességgel mozgó megfigyelő számára speciális relativitás-elméletet kielégítő koordináta-rendszert szerkeszteni, amiben minden pozitív számnak van gyöke. Ez egy 2002-ben publikált probléma megoldása és meglepő a válasz, mert azt mutatja, hogy a téridő elméletben ez a lényeges kérdés más válasszal bír három, illetve négy dimenzió esetén.

Bizonyították, hogy az állandó gyorsulású megfigyelők speciális relativitáselmélet keretében való axiómatikus vizsgálatának nincsen modellje az algebrai valós számok teste felett. Ez az eredmény azt jelenti, hogy míg általában a gyorsuló megfigyelők elméletéhez elegendő a

valós számok elsőrendű elmélete, az állandó gyorsulású megfigyelők létezését feltételezőkhöz már nem elég, ki kell bővíteni az elmélet matematikai részét egyfajta (gyenge) halmazelmélettel.

Bizonyították, hogy a reziduáltakal kiegészített Kleene-algebrákban érvényes *-mentes azonosságokat nem lehet végesen axiomatizálni, akkor sem, ha tetszőleges elsőrendű formulát használhatunk, amiben a * előfordulhat (itt a * az iteráció műveletét jelöli). Ez az eredmény azt mutatja, hogy annak az ára, hogy bizonyos tulajdonságai az osztálynak jobbak lesznek az, hogy a Kleene-algebrák egy szép axiomatizálhatósági tulajdonsága elvész.

Analízis osztály

Leírták a tetszőleges kompakt metrikus térből az n -dimenziós euklideszi térbe menő (Baire kategória értelemben) tipikus folytonos függvény képeinek különböző dimenzióit.

Korábban igazolták, hogy az úgynevezett topologikus Hausdorff-dimenzió a megfelelő eszköz a tetszőleges kompakt metrikus téren értelmezett egyváltozós tipikus folytonos függvény szinthalmazainak Hausdorff-dimenziójának meghatározására. Most topologikus és metrikus eszközöket kombinálva sikerült ezt az eredményt több változóra általánosítani.

Érdekes tételeket bizonyítottak prevalens folytonos függvények szinthalmazairól.

Elkészült az „Introduction to Matrix Analysis and Applications” című könyv kézírata.

A mátrixanalízisben a mátrixvarianciát a klasszikus valószínűségelmélet alapján lehet értelmezni, ugyanakkor a klasszikus esethez képest meglepően eltérő tulajdonságok lépnek fel. Ebben a kérdéskörben felbontási eredményeket sikerült bizonyítani, azaz egy vagy két mátrix (együttes) varianciája meghatározható a megfelelő projekciókhoz tartozó varianciák konvex kombinációjaként.

Azzal a problémával kapcsolatban, hogy lefedhető-e a sík vékony függőleges sávoknak véges sok elforgatottjával, azt sikerült belátni, hogy ha a sávok fél-szélessége $1/5$ -nél nagyobb, akkor ez megtehető.

Általánosították a Wiener–Ikehara-tételt a monotonitás helyett csak gyengébb feltevéseket használva, de mégis effektív hibtagot bizonyítva.

Többváltozós ún. „csontkított” polinomokkal való approximációt vizsgálva a megfelelő Bernstein-polinomok segítségével hibabecslést adtak a konvergencia nagyságrendjére, a folytonossági modulus segítségével.

Diszkrét matematika osztály

Az elmúlt évtizedben alakult ki a nagy gráfok és nagy hálózatok vizsgálata, ami többek között gráfok konvergenciájának értelmezésén alapul. E tekintetben előrehaladást értek el az ún. jobboldali konvergenciával kapcsolatban, ahol ez az új fogalom nagy gráfok kis gráfokba való homomorfizmusainak számaival van értelmezve.

Azt vizsgálták, hogy mely gráfparaméterek konvergensek, ha a gráfsorozat Benjamini-Schramm értelemben konvergens. Kiterjesztették kromatikus polinom gyökmomentumaira vonatkozó korábbi eredményeiket gráfpolinomok egy széles osztályára, aminek a folytatásaként Benjamini-Schramm konvergens gráfsorozatok párosításait írták le.

Sikerült megalkotni a hipervéges gráfok limeszelméletét. Bebizonyították, hogy a limesz objektumok pontosan az amenábilis graphingok. Azt is igazolták, hogy a mérhető paraméterek tesztelhetőek ezeken a gráfosztályokon. Ugyancsak leírták a metrikus mértékterek limeszobjektumait.

A gráf-homomorfizmusok elméletének egy sokat vizsgált kérdése az úgynevezett dualitási párok vizsgálata. Sikerült megadniuk végtelen-véges dualitási párokat (ilyenek léte korábban

nem volt ismert), és egy további cikkben teljes karakterizációt is adtak, amihez bevezették a reguláris fa egy új fogalmát.

Egy több mint 160 oldalas cikkben bebizonyították az immár klasszikus sejtést, hogy ha egy gráfban a pontok fele legalább k fokú, akkor a gráf tartalmaz minden k élű fát részgráfként.

Nevezetes sejtést bizonyítottak lineáris hipergráfokra vonatkozóan. A tétel a korábban kidolgozott magmódszer újabb sikeres alkalmazásának eredménye.

Egy klasszikus eredmény szerint, ha kellően sok halmazból álló halmazrendszert veszünk, akkor lesz előre megadott méretű K részhalmaz, amit ez a halmazrendszer teljesen szétvág, azaz K minden részhalmaza előáll a halmazrendszer nyomaként. Ezt sikerült általánosítani kódokra, megadták a leggyengébb olyan feltételt, amelyre igaz, hogy az olyan teljes szétvágáshoz polinomiálisan sok kódszó elegendő.

Bizonyos P részbenrendezett halmazokra meghatározták, hogy az n elemű halmaz hatványhalmazában P -nek maximum hány példányát lehet találni úgy, hogy két különböző példány elemei között ne legyenek összehasonlíthatók.

Folytatták halmazrendszerek nyomaival kapcsolatos kutatásaikat, aszimptotikusan tetszőleges $k > l$ esetén meghatározták a lehető legnagyobb olyan rendszer méretét, mely k -Sperner marad bárhogyan is hagyunk el az alaphalmazból l elemet. Az $l = 1$ esetet teljesen sikerült megoldani, beleértve az extrémális rendszerek meghatározását is.

Kriptográfiában a legfontosabb elért eredmény, hogy megtalálták a titokmegosztási rendszerek legjobb elérhető hatékonyságát abban az esetben, ha egy fa írja le a hozzáférési struktúrát.

Folytatták extrém hipergráfokkal kapcsolatos kutatásaikat: bebizonyították az utakra vonatkozó Erdős–Gallai-tétel hipergráfokra vonatkozó általánosítását.

Folytatták a Regularitási Lemma alkalmazásaival kapcsolatos kutatásaikat. Több klasszikus színezési probléma általánosítását vizsgálták arra az esetre, ha nem teljes gráfot színezzünk.

Meghatározták a függetlenségi hányados direkt szorzásra vett aszimptotikus értékét tetszőleges gráf esetén. Kiderült, hogy a paraméter a gráf független halmazainak a szomszédságukhoz viszonyított arányából egy egyszerű képlettel számolható. Az eredmény neves matematikusok kérdéseire ad választ, illetve következik belőle az a sejtés, mely szerint a paraméter értéke két gráf diszjunkt uniójára megegyezik a gráfokra külön-külön számolt értékek maximumával.

Korábban máshol vetették fel és néhány speciális esetre meg is oldották azt a kérdést, hogy adott F gráfhoz legfeljebb hány éle lehet egy olyan n szögpontú gráfnak, amelynek az élhalmaza partícionálható F -fel izomorf feszített részgráfokra. Most a keresett számot elhanyagolható hibatagtól eltekintve minden nem üres F gráfra meghatározták.

Tovább folytatták a fokszámsorozatok realizációiról szóló kutatásokat. Befejezték a félig-reguláris páros gráfok realizációiról és mintavételezéséről szóló tanulmányaikat, és sikerült kijavítani a téma alapvető cikkében közismerten meglevő, de eddig javíthatatlannak bizonyult hibát.

Bioinformatikában DNS-kódolással kapcsolatos rekonstrukciós kérdések megoldását általánosították tetszőleges ábécékre. Továbbá leírták egyfelől a legalább minden pontban bifurkációval rendelkező filogenetikus fák számát, másfelől leírták azon filogenetikus fák számát, ahol egyes species címkék egynél több példányban is jelen lehetnek.

Geometria osztály

A diszkrét geometria egyik alapproblémája az adott egybevágó alakzatokból álló legsűrűbb elhelyezések meghatározásáról szól. Az egyik projekt áttekintette a legújabb fejleményeket, és új eredményeket bizonyított kúpokból álló elhelyezésekkel kapcsolatban.

Egy poliédert triangulálhatónak nevezünk, ha előállítható lapok mentén csatlakozó tetraéderek egyesítéseként. Öt olyan poliéder volt ismert, ami nem triangulálható. Sikerült olyan tetraéder osztályt találni, amelyek semelyike sem daraboltó fel véges sok tetraéderre. Ez az általánosabb feltétel (lapcsatlakozást nem ír elő) olyan új bizonyítási módra adott lehetőséget, amivel néhány ismert tétel bizonyítása is lerövidült.

A logaritmikus Brunn–Minkowski-elmélet első lépéseként megoldották a logaritmikus Minkowski-problémát, majd részeredményeket értek el a logaritmikus Brunn–Minkowski-sejtésről.

Felső becslést adtak a legrövidebb út hosszára, amely egy korlátos sugarú gömbökből álló elhelyezés két, a gömbökön kívül egymástól d távolságra fekvő pontját a gömbök elkerülésével köti össze.

Dowker konvex lemezek sokszögekkel való közelítésére vonatkozó tételeit általánosították arra az esetre, amikor a közelítendő lemez r -sugarú körök metszete, amelyet n számú r -sugarú kör metszetével közelítünk.

Megoldottak egy, a gráfrajzadási algoritmusok elméletéből származó fontos kérdést. Egyebek között belátták, hogy megadható a síkban n átlátszatlan, egységsugarú körlemez úgy, hogy akármilyen sorrendben tesszük őket le a síkban, az egyes körök határából felülről látható darabok összhossza $o(n)$.

Megjavították a legjobb ismert korlátot, mely Erdős következő régi problémájával kapcsolatos. Mi az a legnagyobb $f(n)$ szám, hogy a sík tetszőleges konvex n -szögében van egy olyan csúcs, amelytől mérve a többi csúcs legalább $f(n)$ különböző távolságot határoz meg. Erdős sejtése szerint $f(n)$ körülbelül $n/2$; egy ennél $(13/36)n$ -nel nagyobb alsó korlátot sikerült igazolni.

Belátták, hogy bármely k -ra és d -re van olyan $c = c(k, d)$ konstans, hogy minden d -dimenziós n -elemű ponthalmaz legfeljebb c olyan szabályos d -dimenziós szimplexet feszít, melynek élhossza a halmaz által meghatározott összes távolság közül a k -adik legnagyobb.

Ramsey tétele szerint van olyan véges $R = R(k, n)$ szám, amire akárhogyan színezzük meg egy R -elemű X halmaz k -elemű részalmazait 2 színnel, van X -nek egy olyan n -elemű részalmaza, melynek minden k -elemű részalmaza ugyanolyan színű. A legkisebb ilyen R szám becslése a kombinatorika egyik alapkérdése. Azt a kérdést vizsgálták, hogy miként változik ez az érték, ha csak olyan színezéseket tekintünk, amelyekben egy k -as színe csak korlátosan sok valós paramétertől függ. Kiderült, hogy ebben az esetben, amely a geometriai alkalmazásokban fontos szerepet játszik, lényegesen jobb korlát érvényes, ami durván az általános korlát logaritmusával arányos.

Vizsgálták d dimenzióban véges ponthalmazok antipodalitási tulajdonságait. Síkbeli n pont esetén a korábbiaknál jobb becsléseket adtak az antipodális párok maximális számára. Meghatározták 4 dimenzióban n pontra a szigorúan antipodális pontpárok számának minimumát. d dimenzióban becsléseket adtak ugyanennek a számnak minimumára. Új bizonyítást adtak 3 dimenzióban az antipodális, ill. szigorúan antipodális szakaszrendszerekben a szakaszok maximális számára.

Azt mondjuk, hogy két elemet, x -et és y -t szeparálja az S halmaz, ha S x és y közül az egyiket tartalmazza, a másikat nem. Egy halmazrendszer szeparál egy H halmazt, ha H bármely két elemét szeparálja a halmazrendszer valamelyik halmaza. Bebizonyították, hogy tetszőleges n általános helyzetű pont a síkon szeparálható $O(n \log \log n / \log n)$ konvex halmazzal, és léteznek olyan n -elemű ponthalmazok, amelyekre $\Omega(n / \log n)$ konvex halmaz szükséges.

Egy síkbeli S halmazt fedés-felbonthatónak hívunk, ha létezik olyan $k = k(S)$ szám, hogy a sík tetszőleges k -szoros fedése S eltoltjaival felbomlik két fedésre. Korábban fedés-felbontóságra vonatkozó általános pozitív eredmények csak nyílt halmazokra voltak ismertek. Sikerült bebizonyítani, hogy a zárt, középpontosan szimmetrikus konvex sokszögek is fedés-felbonthatóak, és az eredményt általánosították a fedés-felbonthatóság más változataira is.

A polarizációs problémákhoz kapcsolódó újabb speciális eseteket bizonyítottak. Belátták, hogy az inverz spektráltétel teljesül mátrixok egy végtelen osztályára. Megmutatták, hogy bizonyos normálási feltételek mellett az ortogonális keresztpolitópok között a minimális átlagszélességgel a szabályos keresztpolitóp bír, míg maximális az átlagszélessége a legfeljebb 2-dimenziós esetben. Ehhez kapcsolódóan meghatározták, hogy az n -dimenziós normális eloszlású véletlen változók közül melyeknél extrémális a maximum norma várható értéke, a kovariancia mátrix nyomára vonatkozó feltétel mellett.

Halmazelmélet és topológia osztály

Az általuk nemrég bevezetett topologikus Hausdorff-dimenzió segítségével nagyon pontos leírást adtak a fraktálokön definiált generikus függvény szintalmazainak méretére.

Vizsgálták azt a kérdést, mikor adható meg egy topologikus térben olyan szabad ultraszűrő, amelynek van összefüggő halmazokból álló bázisa. Könnyű látni, hogy van olyan T_1 -tér, amin minden ultraszűrő ilyen, viszont sikerült megmutatni azt a meglepő és nem-triviális tény, hogy egy Tyihonov-térben nincs ilyen ultraszűrő.

Tovább folytatták a topologikus terek felbonthatósági tulajdonságainak vizsgálatát. Fő eredményük O. Pavlov egy tételének élesítése: Ha egy T_3 -tér zárt diszkrét alterei számosságainak szupréma kisebb minden nem-üres nyílt halmaz számosságánál, akkor a tér Ω -felbontható. Korábban még az sem volt ismert, hogy ha egy T_3 Lindelöf-térben minden nem-üres nyílt halmaz nem-megszámlálható, akkor az 3-felbontható-e.

Egy topologikus teret bázis-felbonthatónak hívunk, ha minden bázisa két bázis diszjunkt uniójára bontható. Megmutatták, hogy minden önmagában sűrű T_3 Lindelöf-tér bázis-felbontható, de konzisztens olyan önmagában sűrű T_3 -tér létezése, melynek van nyílt-zárt halmazokból álló felbonthatatlan bázisa.

Vizsgálták a következő – a tomográfiához kapcsolódó – geometriai rekonstrukciós problémát: Legyen adva kompakt halmazok egy családja egy euklidészi térben. Teszthalmazok egy rendszere *rekonstruálja* a család egy elemét, ha a teszthalmazokkal vett metszeteinek Lebesgue-mértékei meghatározzák, hogy a család mely eleméről van szó. Eredményeikben – meglepő módon – a mértékelmélet mellett algebrai topológiai, valószínűség számítási és Fourier-analízisbeli módszerek is komoly szerepet játszottak.

Egy fix halmazon értelmezett többváltozós függvények egy családját klónnak nevezzük, ha tartalmazza a projekciókat, és zárt a kompozícióra. Megmutatták, hogy egy megszámlálhatóan végtelen halmaz felett nagyon sok különböző olyan klón van, melyek mindegyike tartalmazza a halmazon értelmezett összes egyváltozós függvényt.

Számelmélet osztály

Analitikus módszerekkel vizsgálták prímekek különbségét. Bebizonyították, hogy a prímekek különbségeként előálló számok még rövid intervallumokban is igen sűrűn vannak (közelítve a Polignac-sejtést, hogy minden páros szám ilyen). Belátták, hogy a szomszédos prímekek különbségei időnként szabálytalanul változnak, amennyiben két szomszédos ilyen különbség hányadosa tetszőlegesen nagy és tetszőleges kicsi lehet. Belátták, hogy ha e differenciákat normáljuk, elosztva az átlagos $\log p$ értékkel, bizonyos általánosan elfogadott sejtések mellett e hányadosok egy intervallumban sűrűn lesznek.

Kombinatorikus számelméleti vizsgálatokat is folytattak. Az összeg-szorzat kérdés kapcsán belátták, hogy véges testben bármely nem túl kicsi halmaz rendelkezik azzal a tulajdonsággal, hogy a halmaz kéttagú összegeiből képzett k tagú szorzatok lefedik az egész testet.

Vizsgálták differenciahalmazok tulajdonságait, különös tekintettel a pozitív karakter-összegekkel való kapcsolatra. Sok, látszatra máshová tartozó probléma ilyen alakra hozható:

ortogonális latin négyzetek, kódok távolsága, torzítatlan bázisok. Készült egy tanulmány az általános halmazok tulajdonságairól, és egy részeredmény született a torzítatlan bázisok kérdésében.

Valószínűségszámítás és statisztika osztály

Meghatározták a több bemenetű csatornák titkossági kapacitását, valamint az „oblivious transfer” kapacitását. Eljárást adtak a konvex integrál funkcionálok momentum-feltételek melletti minimalizálására, és az eredményeket alkalmazták a gazdasági matematikában felmerülő kockázatbecslési feladatokra. (Az oblivious transfer egyfajta feledékeny átvitel melyben egy szövegből részleteket küldünk el annak jelzése nélkül, hogy melyik részlet honnan származik.)

Becslést adtak a relatív entrópia csökkenésének rátájára olyan Gibbs-algoritmusra, amelynél a stacionárius eloszlás sűrűsége pozitív az n -dimenziós euklideszi téren. Ez az eredmény tekinthető a Gibbs-algoritmusra, mint Markov-láncre vonatkozó logaritmikus Sobolev-egyenlőtlenségnek, és következik belőle egy, az említett stacionárius eloszlásra vonatkozó logaritmikus Sobolev-egyenlőtlenség is. Az eredmények dimenziótól függetlenek.

Folytatták vizsgálataikat az ún. kétdimenziós anizotropikus bolyongás témakörében. Ez olyan síkbeli bolyongás, amely Markov-lánc, helytől függő átmenet valószínűségekkel. A modellnek, melyet fizikusok vezettek be az irodalomba, számos fizikai alkalmazása van. Ennek matematikai vizsgálata is történt, de még számos kérdés vár tisztázásra. Ezzel kapcsolatos nyitott probléma a rekurrenciára vonatkozó szükséges és elégséges feltétel. Megadtak olyan feltételeket, melyek mellett a bolyongás rekurrens, illetve tranzien, de ezen feltételek nem fedik le teljesen a lehetséges eseteket, úgyhogy bizonyos esetekben a kérdés továbbra is eldöntetlen.

Egy 1975-ös eredményben úgy határozták meg független tetszőleges eloszlású véletlen számok és normális eloszlású változók együttes eloszlását, hogy a részletösszegek eltérése az elméletileg elérhető legkisebb legyen. Most ezt az eredményt kiterjesztették gyengén függő valószínűségi változókra. Pontos feltételt adtak periodikus és korlátos változású függvényesorok majdnem mindenütt való konvergenciájára.

Effektív módszereket dolgoztak ki olyan nehezebb statisztikai és valószínűségszámítási határeloszlástételek bizonyítására, amelyek az utóbbi időszak kutatásaiban fontos szerepet játszanak. A cél független valószínűségi változók olyan (fontos) nem-lineáris funkcionáljainak a vizsgálata, amelyek esetében a hagyományos módszerek nem alkalmazhatóak.

Megmutatták, hogy az Alzheimer-kórban szerepet játszó amiloid-béta fragmentben szelekció van a HD motívum fenntartására. (A HD motívum egy hisztidin-aszparaginsav párból áll.) A motívum nem pozíciókonzervált, de megtalálható a homológ fehérjék döntő többségében, szignifikánsan nagyobb arányban, mint amennyit várnánk szelekció nélkül. A motívum rendezetlen szerkezetben található és valószínűleg fémkötésben vesz részt.

Megmutatták, hogy az élcserékkel operáló ún. swap Markov-lánc gyorsan konvergál a félig reguláris fokszám-sorozatú gráfokon. Egyszerű összefüggést találtak két gráf swap távolsága és a szimmetrikus differenciájuk maximális körfelbontása között.

Új genetikai modellt adtak a mutáció és szelekció egyensúlyára. Ebben becslést adtak a veleszületett rendellenességek öröklődésének a mértékére.

Meghatározták a leggyorsabban keverő Markov-láncot, amikor az engedélyezett átmenetek egy kört alkotnak, néhány véletlen éllel bővítve.

Nagyméretű gráfok struktúrájának a vizsgálatára ötvözték az ún. blokk modelleket a Rasch-moddal. A modell identifikációjára effektív algoritmust adtak.

Alkalmazások

A Rényi Intézetben végzett kutatások döntő többségét a matematika belső fejlődése által felvetett kérdések vizsgálata alkotja. A felfedező kutatások mellett azonban az intézet egyre erőteljesebben próbálja alkalmazni az alapkutatásokban elért új eredményeit, valamint a matematika bevált módszereit más területeken is. Ezek közé tartozik a háromdimenziós topológia eredményeinek felhasználása a DNS rekombináció kérdéseire (az egyik Lendület kutatócsoport keretében), a bioinformatikai kutatások (részben egy európai uniós konzorciális projekt keretében), kriptológiai kutatások (egy másik Lendület kutatócsoport keretében), továbbá egy új algoritmus kidolgozása az áruszállítási feladatok ütemezésre. A bioinformatikai kutatások keretében a Rényi Intézet tagja (volt) az ITFoM (Information Technology Future of Medicine) FET flagship projektnek, mely a 2013-ban érkezett hírek szerint végül nem került be a két nyertes FET flagship projekt közé, illetve tagja „Sertések reprodukciós és légzőszervi szindrómáját okozó vírus (PRRSV) magyarországi izolátumainak filogenetikai összehasonlítása és megbetegítő képességének vizsgálata” elnevezésű TÁMOP projektnek. A „Comparative Genomics and Next Generation Sequencing” európai uniós konzorciális projekt az eredeti ütemezéssel ellentétben, a többi konzorcionális tag késedelme miatt átnyúlik 2013-ra. A Rényi Intézet szerepe változatlan, ők végzik az új generációs szekvenálási módszereket tartalmazó szoftverfejlesztés nagyobb részét.

Az első akadémiai Lendület-projekt keretében létrejött kriptológiai kutatócsoport sikeresen folytatta a kriptográfia egyik fontos problémakörének, a titokmegosztásnak a kutatását. Korábbi eredményeikre támaszkodva vizsgálták a titokmegosztás folytonos változatát, rámutattak a mérhetőség fontosságára: annak a függvénynek, ami a titokrészekből állítja elő a titkot, mérhetőnek kell lennie, egyébként paradox rendszerek építhetők. A szokásos Shamir-féle titokmegosztást nem lehet a végtelen esetre általánosítani, mivel nem létezik egyenletes eloszlás végtelen testeken, de Gauss-folyamatokat használva sikerült újfajta konstrukciókat adniuk. Kimutatták, hogy nem minden lehetséges elérési struktúrához létezik (közelítőleg) tökéletes titokmegosztás. Topológiai jellemzőket felhasználva sikerült mindazokat a struktúrákat jellemezniük, amelyek ilyen tulajdonságúak.

Jelentősek a matematikai statisztika különböző célú felhasználásai, amelyekben az intézet munkatársai számottevő segítséget tudnak adni az adott problémakör összefüggéseinek feltárásában. Ide tartozik egy genetikai alapú oxidatív stressz előrejelző teszt kidolgozása, a születési szív-rendellenességek kockázati tényezőinek, illetve hatásainak statisztikai vizsgálata, az Országos Onkológiai Intézet által elvégzett „new generation sequencing” mérések kiértékelése, továbbá a Nyugdíjfolyósító Intézet adatbázisán elvégzett statisztikai vizsgálat.

A kutatók szakmai előmenetele

Az intézet munkatársai közül 2012-ben három kutató kapta meg az MTA doktora címet, egy kutató pedig a PhD-fokozatot. Az év végén 14 akadémikus (az átlagos statisztikai állományi létszám szerint 10), 35 akadémiai doktor (stat. átl. 29) és 29 PhD-fokozattal rendelkező, illetve kandidátus (stat. átl. 26) dolgozott az intézetben, 13-an még nem szereztek tudományos fokozatot. Nagy hangsúlyt fektetnek a fiatal – PhD-tanulóikat folytató vagy éppen azt befejező – tehetségek bevonására az intézeti kutatómunkába. 2012 folyamán további hat fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémia által biztosított új, illetve megüresedett fiatal kutatói álláshelyeken. Ezekkel együtt 2012-ben összesen 15 fiatal kutató dolgozott az intézetben, két munkatárs foglalkoztatása pedig megszakítás miatt szünetelt. Az intézet szerződéses

kapcsolatban áll a Közép-Európai Egyetemmel (CEU), amelynek keretében 17 doktorandusz munkáját irányította intézeti kutató.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet alapkutatási témáinak többsége sajnos nem alkalmas a társadalommal folytatott párbeszéd közvetlen tárgyának. Ugyanakkor a kutatók nemzetközi sikerei, így különösképpen az intézet kutatója által elnyert Abel-díj a médiában is megjelenítették az intézetben folytatott kutatásoknak a jelentőségét.

Az intézet munkatársai fontos szerepet vállalnak a matematika népszerűsítésében, ismeretterjesztő előadásokat tartanak középiskolások és egyetemisták számára. Rendszeresen sor kerül a Magyar Tudomány Ünnepe keretében az intézeti tájékoztató rendezvényre, ahol elsősorban középiskolások és tanáraik tájékozódhatnak a matematikusi pálya kihívásairól és szépségeiről. Az intézet munkatársai részt vesznek a matematikai tehetségek gondozásában, 2012-ben is számos matematikai tábort és más rendezvényt szerveztek a tárgy iránt érdeklődő diákoknak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet kutatói több budapesti és vidéki felsőoktatási intézmény (ELTE, BME, Debreceni Egyetem, Szegedi Tudományegyetem, Pannon Egyetem stb.) munkájában vesznek részt. Különösen jelentős a szerepük a doktorképzésben és a mesterszakos képzésben. Az intézet kutatói közül 18-an törzstagok különböző doktori iskolában, 41 doktorandusz munkáját irányítják témavezetőként. Kiemelt jelentőségű az intézet számára a Közép-Európai Egyetem (CEU) Matematikai Tanszékével folytatott együttműködés. 2012-ben került sor a CEU és a Rényi Intézet közötti együttműködési szerződés megújítására. A CEU matematikai doktori és mesterképzési programjának oktatói és témavezetői zömében az intézet kutatói közül kerülnek ki, a tanszék új vezetője, és a doktori program irányítója is az intézet munkatársa. A tanszék 2012-ben lezajlott nemzetközi értékelése során is kiemelt elismerést kapott a Rényi Intézet szerepe a doktori program működtetésében. A Budapest Semesters in Mathematics angol nyelvű egyetemi részképzési program oktatóinak java része is az intézet kutatója. Ez a program az amerikai egyetemekre viszi el a magyar matematika híret, és mintául szolgál más nemzetközi oktatási programok (pl. AIT) számára is. Az intézet számára nagy jelentőségű a tudományos utánpótlással való közvetlen kapcsolat, ennek jegyében 2012-ben az intézet 43 munkatársa, a teljes kutatói létszám 55%-a oktatott valamelyik hazai felsőoktatási intézményben.

Az intézetben heti rendszerességgel folyó szakmai szemináriumok munkájában igen nagy számban vesznek részt más intézmények, köztük vidéki egyetemek munkatársai is, ezáltal ezek a szemináriumok az egész hazai matematikai életre jelentős hatást gyakorolnak.

A Rényi Intézet kutatói a matematikai közélet feladataiból hagyományosan számarányukon felül veszik ki részüket. Ezek között említhető az MTA Matematikai Tudományok Osztályában és akadémiai bizottságokban, az OTKA testületeiben, a Bolyai János Matematikai Társulatban (BJMT) végzett munka. Az MTA III. Osztály elnöke, az MTA Matematikai Bizottság elnöke és titkára, a Bioinformatikai Osztályközi Állandó bizottság egyik alelnöke és titkára, a Bolyai János kutatási ösztöndíj Kuratóriumának elnöke, az AKT

Matematikai és Természettudományi Szakbizottságának elnöke, a SZTAKI külső tanácsadó testületének elnöke, a BJMT elnöke, a Magyar Bioinformatikai Társaság alelnöke mind a Rényi Intézet kutatói.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet kutatói igen széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. A társszerzős munkák zömében a szerzők között az intézeti kutató(k) mellett külföldi matematikusokat találunk. Közös projektek és közösen szervezett konferenciák is jellemzőek. Az intézet munkatársai közül 2012-ben húszan vettek részt nemzetközi konferencia szervezésében, néhányan közülük több alkalommal is. Az intézetben ebben az évben a szokásosnál kevesebb konferenciára került sor. Kiemelkedik az American Institute of Mathematics által szervezett „Motivic Donaldson–Thomas theory and singularity theory” konferencia, amely azon kisszámú rendezvények egyike volt, amelyet ez az amerikai intézet Európában rendezett meg. Nyáron az Alacsony dimenziós topológia Lendület kutatócsoport munkájához kapcsolódóan került sorra a European Science Foundation által támogatott CAST nyári iskola és konferencia. Ősszel a „First International Conference on Logic and Relativity” konferencia a matematikai logika és a relativitáselmélet összekapcsolásának izgalmas kérdéseit vitatta meg. Az intézetben dolgozó fiatal kutatók szervezésében immár negyedik alkalommal került sor az ún. „Emléktábla Workshop”-ra.

Az MTA kétoldalú cserekapcsolatok keretében megvalósult utazások sikeresen szolgálták a tudományos együttműködést, segítségükkel eredményes közös kutatások folyhattak, hasznos információcserére, illetve konferencia-részvételre nyílt lehetőség.

Az intézet kutatói összesen 12 nemzetközi tudományos bizottságban vettek részt, például a European Set Theory Society alelnöke is a Rényi Intézet kutatója. 146 alkalommal szerepel intézeti kutató neve nemzetközi folyóirat szerkesztő bizottságának névsorában. A munkatársak 2012-ben összesen 218 előadást tartottak nemzetközi rendezvényeken, ezek közül sokat meghívott, illetve plenáris előadóként.

Az intézetből 2012-ben kilenc kutató volt távol fél évnél hosszabb ideig a következő külföldi intézményekben: University of Chicago (USA), Auburn University (USA), University of Delaware (USA), City University of New York (USA), National Science Foundation (USA), Simon Fraser University (Kanada), Kuwait University (Kuwait), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svájc).

Az intézeti kutatók által elnyert ERC támogatások, illetve a Lendület projektek forrására támaszkodva összesen 10 külföldi kutató dolgozott az intézetben néhány hónapot, de más finanszírozási formában is többen voltak itt tartósbabban, például egy vendégkutató Koreából is. Az intézet külföldi látogatóinak száma 2012-ben – a körülbelül 200 konferencia-, illetve nyári iskola résztvevőt, illetve az alkalmazásban lévőket nem számítva – közel 80 fő volt.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

A Rényi Intézet a lehetőségekhez képest hagyományosan, és 2012-ben is kiemelkedően jól szerepelt a hazai OTKA-pályázatokon. 2012-ben újabb négy kutatási és egy nagy kutatócsoport által beadott pályázat nyert el támogatást. Összességében az OTKA-projektek támogatása intézeti szinten kismértékben növekedett és sikerült fenntartani azt a helyzetet,

hogyan az intézet kutatói – szinte kivétel nélkül – részt vesznek különböző OTKA-projektekben. A nominális OTKA-bevételek 2011-hez viszonyított nagyobb mértékű növekedése abból fakad, hogy négy OTKA-projekt esetében is a 2011. évi támogatások különböző okokból csak 2012-ben érkeztek be.

Továbbra is különösen értékesek, az intézet részére nagyon fontosak az akadémiai Lendület program keretében meghirdetett pályázatok. A 2009-ben elnyert és 2012-ben véglegesített kriptográfiai kutatási és a 2010-ben elnyert alacsony dimenziós topológiák kutatására kapott második Lendület-projekt után 2012-ben újabb fiatal kutató nyert Lendület-pályázatot Csoport-, gráf- és ergodelméleti kutatócsoport létrehozására. Így a Lendület-projektek együttes támogatottsága adta a hazai, nem OTKA finanszírozású pályázati bevételek döntő többségét.

A fentiekén kívül 2012 folyamán Magyarországon semmilyen más pályázati lehetőség nem állt rendelkezésre sem az elméleti, sem az alkalmazott matematikai kutatásokra.

Nemzetközi pályázatok

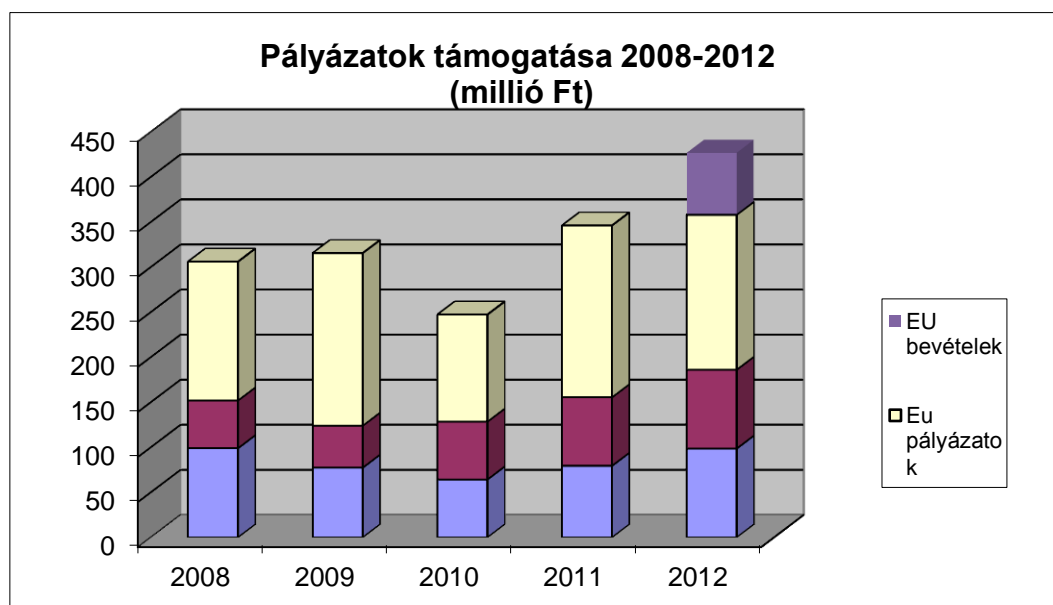
A 7. keretprogram új típusú pályázati elemeként jelentkező, a European Research Council pályázatai egy-egy – még kevésbé tapasztalt, ill. tapasztalt – tudós vezetésével létrehozott kis kutatói csoportok kutatásainak segítségét célozzák meg hosszabb távra, jelentősebb, projektenként akár több millió eurós támogatással. Ennek megfelelően viszonylag kevés projektet támogatnak és igen nagy a verseny. Kiemelkedő eredmény, hogy a 2008-ban nyertes PRIMEGAPS, a 2010-ben nyertes DISCONV és a 2011-ben nyertes LTDBud projektek után az Advanced Investigators Grant 2012-es fordulójában egy újabb, Abel-díjas kutató által vezetett és több más munkatársat is magába foglaló, „Regularity and Irregularity in Combinatorics and Number Theory” elnevezésű projekt nyert támogatást. A támogatott kutatás a szerződés megkötése után, 2013 első felében indul, amivel összesen négyre nő az intézeti ERC Advanced grantek száma.

A 7. keretprogram keretében négy egyéni kutatói mobilitási pályázatot adtak be külföldi vagy külföldön élő magyar kutatók, melyek közül egy nyert, és 2013-ban indul. További két ERC Starting Grant pályázat került beadásra, melyek közül egy bekerült a második fordulóba, ahol a döntés csak 2013-ban születik meg.

Összességében, a rendkívül alacsony szinten stagnáló hazai pályázati lehetőségek ellenére az intézet 2012. évi pályázatokból származó bevétele meghaladta a 2011. évi (és minden korábbi évi) hasonló bevételeket. Az OTKA-tól és a Lendület projektekből érkező támogatások kis mértékben meghaladták az előző évi hasonló bevételeket, míg az EU-ból származó, 2012-re elszámolt nemzetközi pályázati bevételek kis mértékben a 2011-es szint alatt maradtak. Új elemként került kimutatásra az EU-s pályázati támogatásból finanszírozott, de saját bevételként elkönyvelt szerződéses K+F kutatási bevétel, mely jelentős mértékben járult hozzá a rekord mértékű összeghez.

A futó Lendület-, OTKA- és EU-s, illetve a 2012-ben elnyert Lendület- és a 2013-tól futó új EU-s pályázatok együttesen biztosítják, hogy a pályázati bevételek 2013-ban sem csökkenjenek nagy mértékben, annak ellenére, hogy az intézet első Lendület- és ERC Advanced Grant-projektjei 2012-ben, illetve 2013 első félévében lezárulnak.

A következő diagram mutatja a pályázati bevételek alakulását az elmúlt 5 év folyamán.



V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Abért M, Nikolov N: Rank gradient, cost of groups and the rank versus Heegaard genus problem. J Eur Math Soc, 14 (5): 1657-1677 (2012)
2. Ánh PN, Márki L, Vámos P: Divisibility theory in commutative rings: Bezout monoids. T Am Math Soc, 364 (8): 3967-3992 (2012)
3. Balka R, Buczolicz Z, Elekes M: Topological Hausdorff dimension and level sets of generic continuous functions on fractals. Chaos Soliton Fract, 45 (12): 1579-1589 (2012)
4. Benyamini Y, Kroó A, Pinkus A: L^1 -approximation and finding solutions with small support. Constr Approx, 36 (3): 399-431 (2012)
5. Berkes I, Horváth L, Rice G: Weak invariance principles for sums of dependent random functions. Stoch Proc Appl, 123 (2): 385-403 (2012)
6. Blomer V, Harcos G: A hybrid asymptotic formula for the second moment of Rankin-Selberg L-functions. P Lond Math Soc, 105 (3): 475-505 (2012)
7. Borgs C, Chayes JT, Lovász L, T. Sós V, Vesztergombi K: Convergent sequences of dense graphs II. Multiway cuts and statistical physics. Ann Math, 176 (1): 151-219 (2012)
8. Böröczky K Jr, Lutwak E, Yang D, Zhang G: The log-Brunn-Minkowski inequality. Adv Math, 231 (3-4): 1974-1997 (2012)
9. Csirmaz L, Tardos G: On-line secret sharing. Design Code Cryptogr, 63: 127-147 (2012)
10. Elek G, Szegedy B: A measure-theoretic approach to the theory of dense hypergraphs. Adv Math, 231 (3-4): 1731-1772 (2012)
11. Frankl P, Füredi Z: A new short proof of the EKR theorem. J Comb Theory A, 119 (6): 1388-1390 (2012)

12. Juhász I, Magidor M: On the maximal resolvability of monotonically normal spaces. *Isr J Math*, 102 (2): 637-666 (2012)
13. Miklós I, Zádori Z: Positive evolutionary selection of an HD motif on alzheimer precursor protein orthologues suggests a functional role. *Plos Comput Biol*, 8 (2): e1002356 (2012)
14. Némethi A: The cohomology of line bundles of splice-quotient singularities. *Adv Math*, 229 (4): 2503-2524 (2012)
15. Ozsváth A, Stipsicz A, Szabó Z: Combinatorial Heegaard Floer homology and nice Heegaard diagrams. *Adv Math*, 231 (1): 102-171 (2012)
16. Némethi A, Szilárd Á: Milnor fiber boundary of a non-isolated surface singularity. Berlin; Heidelberg: Springer Verlag, 2012. 240. (Lecture Notes in Mathematics; 2037.)
17. Andréka H, Ferenczi M, Németi I (szerk): Cylindric-like algebras and algebraic logic. Berlin: Springer Verlag, 2012.

AZ MTA RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI ADATAI 2012-BEN

Főbb mutatók 2012-ben

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	99	Ebből kutató ² :	78	
PhD, kandidátus:	26	MTA doktora:29	Rendes tag és levelező tag:	10
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			16	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			22	

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	161		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	159		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	16		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	127		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	120		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	107,021	Összes független hivatkozás száma:	3038
Összes hivatkozás száma ⁸ :	3601		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	1	MTA doktora:	3
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	218		
	posztterek száma:	2	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	12	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	146
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	43		
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	8
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:	41

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	520 745	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	11	Teljes saját bevétel:	265 861	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft		
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	25			
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	106 496	E Ft	
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0			
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:	9			
	A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	171 944	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0			
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	80 175	E Ft		

Részletezett pénzügyi adatok 2012-ben

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	520 745	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	265 861	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	106 496	E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	171 944	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	78 613	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	1562	E Ft

MTA SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

1111 Budapest, Kende u. 13-17.; 1518 Budapest, Pf. 63.
telefon: (1) 279 6184; fax: (1) 466 7503
e-mail: peter.inzelt@sztaki.mta.hu; honlap: <http://www.sztaki.hu/>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az MTA SZTAKI által művelt kutatási területek összhangban vannak a világ előtt álló nagy kihívások (*big challenges*) többségével. 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. Az Új Széchenyi Terv az egész gazdaság szempontjából prioritással kezeli a mobilitás, a járműipar, és a logisztika; az informatika és az új energetikai és környezetvédelmi fejlesztések K+F+I témaköröket. Természetes módon, a tématerületek harmonizálnak az *EU kiemelt K+F programjaival*, elsősorban az Information and Communication Technologies; Materials and New Production Technologies; Factory of the Future, Energy, Transport (including Aeronautics) programokkal.

Az informatikai fejlődés egyik legjelentősebb irányzatát az ún. kiber-fizikai rendszerek (cyber-physical systems, CPS) képviselik, mely elnevezés alatt az informatikai (virtuális) és a valós világ újabb, az eddigieknél lényegesen magasabb fokú és egyben mélyebb interakcióját, integrálását értik. E rendszerek olyan számítási struktúrák, melyek intenzív kapcsolatban állnak a környező fizikai világgal, a fizikai folyamatokkal, egyúttal kiszolgálják és hasznosítják az interneten elérhető adatelérési és adatfeldolgozási szolgáltatásokat. Ilyen szempontból túllépnek a beágyazott rendszerek (embedded systems) megközelítésén, hiszen integrálják a beágyazott rendszerekben jelen lévő számítási képességeket a kiber-világ adatelérési és –feldolgozási képességével, heterogén környezetben működnek, és biztosítják a fizikai világgal való intenzív interaktív kapcsolatot.

A CPS jelentős alapkutatói kihívásokat jelent. Itt kooperatív, de egyben autonóm elemekről, alrendszerekről van szó, melyek szituációtól függően kerülnek kapcsolatba egymással, ezáltal kibontakozó (emergens) viselkedéssel rendelkeznek. Működésük modellezése, viselkedésük előrejelzése is alapkutatói feladatok sorát veti fel, nem beszélve e rendszerek valamilyen szintű irányításáról. Az analitikus és a szimuláción alapuló megközelítéseknek a megszokottnál jelentősebb integrálása vetíthető előre. Alapvető kérdés az autonómia, a kooperáció és az optimalás viszonyának felderítése. A szenzorhálózatok kutatása is újabb impulzusokat kaphat a kiber-fizikai rendszerek előretörése kapcsán. Szembe kell nézni a nagy adattömegek kezelési, a bennük rejlő információk kinyerési, ábrázolási, értelmezési kérdéseivel, nem beszélve a biztonsági szempontokról. Az ember-gép kapcsolatok újabb foka szükséges, illetve valósítható meg a kiber-fizikai rendszerek kialakítása során.

A felhasználási területek szinte végtelenek: légi és földi közlekedés; diszkrét és folytonos gyártási rendszerek; logisztika; gyógyászat, energiatermelés, a minket körülvevő infrastruktúra, szórakoztatás, és a sort folytathatnánk még tovább. A kiber-fizikai megközelítések által „smart” városokhoz, gyártási, közlekedési, logisztikai, energetikai rendszerekhez vezethetnek és hozzájárulhatnak egy újabb életminőség megteremtéséhez. Ez utóbbi téren már kiber-fizikai társadalomról (cyber-physical society-ről) is beszélhetünk, ami már nem csak a fizikai és kibernetikai tereket, hanem az emberi, társadalmi, kulturális szférákat is magában foglalja.

Az intézet nevében szereplő két kulcsszó (automatizálás és számítástechnika) kellően jelzi, hogy eddigi célkitűzése és tevékenysége összhangban van a kiber-fizikai rendszerek által jelentett kihívásokkal. 2012-ben a fő feladatuknak tevékenységük további fókuszálását, a CPS kutatásához szükséges infrastruktúra (3D-internet, irányítástechnikai, SmartFactory, felhő-számítások laboratóriumok) és olyan, ütőképes méretű – akár nemzetközi dimenziójú – szervezeti egységek kialakítását tekintették, melyek képesek az alapkutatási eredményekre támaszkodó K+F tevékenység legalább prototípus szintig történő végig vitelére.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A következőkben négy alapkutatási főirányuk (számítástudomány, rendszer- és irányításelmélet, mérnöki és üzleti intelligencia, gépi érzékelés és interakció) bemutatása mellett öt alfejezet foglalja össze, hogy az alapkutatási eredményeik miképpen támogatják azokat a kutatás-fejlesztési tevékenységeket, melyek mind EU-szinten (Horizon 2020), mind Magyarországon (Új Széchenyi Terv) kiemelt jelentőségűnek kezelt területeket céloznak. Így külön alfejezet taglalja a járműipar és közlekedés, a termelésinformatika és logisztika, az energia és fenntartható fejlődés, a biztonság és felügyelet, valamint a hálózatok, az elosztott számítások és a jövő internete témakörökben elért alkalmazás-orientált eredményeiket.

Alapkutatási főirányok

Számítástudomány

Számítástudományi kutatásaik során több, egymással összefüggő terület szinergiáit aknázzák ki: algoritmusok elmélete, kiemelten a párhuzamosítás, az új hardver-architektúrák kihasználása céljából; adatbányászat és információ-visszakeresés; gépi tanulás, adatbázisok elmélete, illetve extrémális gráfok. Céljuk az üzleti intelligencia, a Web adatbányászata és a tudomány területén jelentkező extrém méretű információfeldolgozási problémák megoldása, az adatokban rejlő mintázatok, szabályszerűségek felismerése, kinyerése.

2012-ben elért főbb eredményeik:

Képek vizuális tartalmát dolgozták fel grafikus ko-processzorok, GPGPU segítségével megvalósított fejlett gépi tanulási eszközökkel. Csapatuk hajszállal lemaradva a második legjobb eredményt érte el az ImageCLEF 2012 Photo versenyen, amelyen nyílt forráskódú módszereket (Gauss keverék felbontás, Fisher kernel eljárás) alkalmaztak.

Adatbányászat terén az intézet csapata a „Good Support for the Data Preparation, Analysis, and Presentation Process” díjat nyerte az IEEE Visual Analytics Science and Technology Challenge 2012 versenyen.

Gráfalgoritmusok területén a síkgráfok irányított diszjunkt út problémáját kutatva, továbbfejlesztették a Schrijver által rögzített számú terminálpár esetére adott, klasszikus, polinominális idejű algoritmust, azt uniform polinomiális futási idejűvé téve.

Az intervallumgráfok alkalmas modellezési eszközök számos (pl. biológiai vagy ütemezési motivációjú) feladatnál, ezért természetesen adódó kérdés egy gráfnak az intervallumgráfok osztályától való távolságának a meghatározása. A csúcstörési távolság esetére sikerült uniform polinomiális algoritmust adniuk.

A teljes mátrixalgebrákra vonatkozó explicit izomorfizmus problémát illetően jelentősen egyszerűsítették és gyorsították korábbi algoritmusukat a gyakorlati szempontból érdekes alacsony dimenziós esetekben.

Sikerült új, erősebb alsó és felső korlátokat adni bizonyos gráftulajdonságok kommunikációs bonyolultságára, a hagyományos determinisztikus, a klasszikus randomizált és a kvantum modellekben is. A vizsgált gráftulajdonságok között van az összefüggőség, az Euler-tulajdonság és a teljes párosítás létezése.

Új eljárást fejlesztettek ki és FPGA-s architektúra készült 2 és 3 dimenziós nem strukturált rácsokon történő számítások sebességének növelésére, mely a rácsponatok átsorszámozásával megadja a nem strukturált rács rácsponjtainak frissítési sorrendjét.

ERC- és Lendület ösztöndíjakat is eredményező alapkutatói eredményeikre támaszkodó kutatás-fejlesztési tevékenységüket a Magyar Telekom NyRt., az AEGON Magyarország Általános Biztosító ZRt., a Vodafone Magyarország és hazai kis- és középvállalkozások (Schibsted Media Group, Glia Kft, Petabyte Kft) együttműködésével végzik. Az AEGON ügyfélismereti és csalás-felderítési technológiájukat alkalmazza. A Magyar Telekom, a Vodafone és az AEGON az általuk fejlesztett magyar nyelvű keresőrendszer felhasználói, valamint a KKV-k mellett a szöveges adatbányászati K+F eredmények kísérleti terepe.

Rendszer- és irányításelmélet

Az irányítási rendszerek elméleti és módszertani hátterét a matematikai rendszer- és irányításelméleti kutatások adják. Ezek alapozzák meg az automatizált irányítási rendszerek alkalmazásával kapcsolatban az intézetben végzett egyéb kutatás-fejlesztési tevékenységet is. A kutatás fő tématerületei a rendszermodellezés és –identifikáció, az adaptív és robusztus irányítási, jelfeldolgozási és szűrési módszerek, az elosztott és hálózatba kapcsolt rendszerek irányítása, valamint a folyamatrendszerek. Lineáris és nemlineáris rendszerek, mind folytonos és diszkrét idejű megközelítésben, valamint a determinisztikus és sztochasztikus szemléletmód egyaránt figyelmet kapnak.

A *nemlineáris rendszerek irányításelméletéhez* kapcsolódva LPV (Linear Parameter Varying) és qLPV (quasi Linear Parameter Varying) modelleket alkalmazó robusztus irányítástervezés során felmerülő kérdésekben értek el új eredményeket az indefinit geometriák és a Möbius transzformációk irányításelméleti vizsgálatokban betöltött szerepével összefüggésben. Megadták az időtartományi robusztus tervezés egy alapfeladatának teljes megoldáshalmazát, és kidolgozták a kapcsolódó lineáris algebrai eszközöket. Feltételt adtak arra nézve, hogy a tervezés során a qLPV szabályozó ütemezési változóit hogyan lehet megválasztani.

Kidolgozták a TP-tau modell-transzformáció módszerét, mely képes időkéséses rendszereket átalakítani nem időkéséses polytóp alakban adott qLPV rendszerré, ahol az időkésés külső paraméterként jelenik meg, és melyre már a Lineáris Mártixegyenlőtlenség (LMI) alapú modern irányításelméleti módszerek közvetlenül alkalmazhatók. Ezzel a qLPV, politopikus és LMI alapú modern irányításelméleti tervezési módszertanok körét időkéséses rendszerekre terjesztették ki. A módszer hatékonyságát egy erővisszacsatolt, interneten keresztül vezérelt, Japánban működő robot-megfogóval végzett kísérlettel igazolták, melynek a fő problémája az internet okozta időkésés, melyre a szakirodalom nem ismer hatékony megoldást.

A *jelfeldolgozás és rendszeridentifikáció* területén, a racionális ortogonális bázisokon alapuló identifikációs módszerek alapján egy új, hiperbolikus wavelet konstrukciókon alapuló nemparametrikus rendszeridentifikációs módszert dolgoztak ki, melynek lényege, hogy az eredeti – frekvenciatartománybeli adatokból kiinduló – eljárást egy diszkrét időtartománybeli mérésekből kiinduló módszerrel egészítették ki.

Optikai felületek újszerű modellezése területén is születtek új eredmények. A hagyományosan művelt Zernike és Csebisev rendszer alapú felületreprezentáció mellett általános, a rendszerelméletből eredő módszerek kutatására került a hangsúly, amelyek a várakozások szerint lehetővé teszik a mérési pontok mért tartományon belüli tetszőleges kijelölését. Ez a

tulajdonság a fizikailag realizálható mérési eljárásokkal konform felületmodellezési módszerek kidolgozására ad lehetőséget.

A rendszer- és irányításméleti eredmények primer felhasználói az energia, jármű és közlekedéssipar. Az ipari partnerek (Airbus, Bosch, Knorr-Bremse) bevonásával végzett európai és nemzeti kutatási projektekből (ADDSAFE-FP7, TRUCKDAS-NFÜ) az elméleti eredmények gyakorlati alkalmazhatóságát szem előtt tartva folytattak kutatási tevékenységet. Ipari felhasználásra előkészített eredmények születtek korszerű járműfedélzeti irányító-rendszerek hibátűrő kialakításának tervezésére, a járműflották koordinált irányítására, az intelligens vezető nélküli járműirányítási megoldásokra, szenzorfüzión módszerek alkalmazására és az elektronikus fék és kormány alkalmazásának integrált irányítási módszereire.

Mérnöki és üzleti intelligencia

Napjaink egész világot átfogó műszaki és gazdasági rendszereit rendkívüli komplexitás jellemzi. Tervezésük és irányításuk – ami gyorsan változó, bizonytalan környezetben magában is hatalmas kihívás – új keletű problémája az önálló döntési helyzetben lévő felek kooperációjának támogatása. A felmerülő problémák megoldásakor kiemelt jelentőségű a nagy tömegű, általában elosztottan keletkező és tárolt információ hatékony kezelése. A kutatás több tudományterület – jellemzően a számítástudomány, az operációkutatás, a gyártástudomány és a tudásalapú módszerek – együttes művelését igényli.

A 2012-ben elért alapkutatási eredményeik közül elsősorban a következők emelendők ki: Egészértékű programok megoldásához általánosították Gomory vegyes vágásait a bináris változók 0-1 korlátjainak figyelembevételével. Megmutatták, hogy a látszólag erősebb egyenlőtlenségek Gomory vágásokként is levezethetők.

Általánosították a félkész terméket előállító feladatok ütemezési modelljét a szállítási határidőkhöz képesti késéssel. Az új modell számos változatának vizsgálták a számítási bonyolultságát, és egy teljesen polinomiális approximációs sémát adtak a maximális késésre vonatkozó célfüggvényre.

Egy új, nem-aszimptotikus rendszer-identifikációs módszert fejlesztettek ki, az SPS (Sign-Perturbed Sums) algoritmust, amely – minimális statisztikai feltevések mellett – képes véges minták alapján egzakt konfidencia tartományokat építeni általános lineáris rendszerekhez (pl. ARMAX, Box-Jenkins), tetszőleges konfidencia-valószínűséggel.

Hatékony, sztochasztikus approximáción alapuló módszert adtak bináris, kvantált méréseken alapuló becslési problémák erősen-konzisztens megoldására, ARX rendszerek esetére.

Új modellt és megoldó eljárást dolgoztak ki a bonyolult, szabadformájú felületekkel is rendelkező alkatrészek megmunkálási folyamatainak tervezésére, amely a geometriai következtetés és a kombinatorikus optimalizálás együttes alkalmazásán alapul.

Beszállítói hálózatok koordinációs problémájának megoldása érdekében általános módszert dolgoztak ki a játékelmélet, közelebbről az ún. mechanizmus tervezés apparátusának alkalmazására, mellyel analitikusan is elemezni lehet koordinációs mechanizmusok elvárt tulajdonságait.

A relaxációs technikák hatékonyan alkalmazhatóak a belső pontos algoritmusokban leggyakrabban előforduló numerikus problémák kezelésében. A konvergencia tételre adott új bizonyítással általánosították az ismert regularizációs eljárásokat.

Új eredményeket értek el a reciprocitási tulajdonság nélküli páros összehasonlítási mátrixok konzisztens mátrixokkal legkisebb négyzetes normában való közelítésének konvexitási kérdései területén, elégséges feltételeket adva arra vonatkozóan, hogy mikor határozható meg az ilyen feladatok globális optimuma lokális kereséssel.

A kutatások részben EU által támogatott projektek keretében folynak, melyekben néhány esetben konzorciumvezetői szerepet is ellátnak. Elméleti eredményeik alkalmazott, iparban is

hasznosuló kutatásokat alapoztak meg (lásd a Termelésinformatika és logisztika, illetve az Energia és fenntartható fejlődés pontokat).

Gépi érzékelés és interakció

Egyre nagyobb jelentőséggel bír a géppel érzékelt világ adatainak felismerése, a különböző források adatainak térbeli és tér-időbeli fúziója, a térben és időben különböző mérések közötti kapcsolatok felfedése, geometriai feldolgozása és modellezése; a mérési és felismerési/csoportosítási adatok adatbázisba szervezése, kezelése és megjelenítése; kül- és beltéri objektumok és színterek statikus és dinamikus rekonstrukciója, szerkesztése, animációja.

Leginkább kiemelésre érdemes 2012-es eredményeik:

Háromdimenziós kültéri lézerszkennerek felvételeiből állították elő a jármű- és gyalogosforgalom térbeli modelljét. Többkamerás környezetben járókelők pontos térbeli lokalizálására dolgoztak ki adatfúziós eljárásokat, geometriai és statisztikai optimalizálási eljárásokkal.

A légkép-elemzés számára új típusú képleíró eljárásokat vezettek be, amelyek a képi adatbázis hatékony kezelésével együtt hatékonyan működnek a légi-felderítésben és a földfelszíni területek osztályozására.

A Hitachi-val folytatott együttműködés keretében algoritmusokat adtak energetikai nagyberuházásokkal kapcsolatos építkezések Lidar-alapú felügyeletére.

Mikrohullámú és THz tartományú eljárást és eszközt alakítottak ki és szabadalmaztattak, mely a szakirodalom szerint jelenleg a legérzékenyebb THz detektor, amelyet standard CMOS technológiával (azaz gazdaságosan) lehet előállítani. Ez az egyetlen olyan elrendezés, amely az in-phase és quadrature-phase jeleket csupán a vevő antennák megfelelő kialakításával, azaz mozgó alkatrész nélkül képes venni.

Digitális holografikus (térfogati) mikroszkópot (DHM) fejlesztettek ki ivóvízben megjelenő férgek kimutatására, osztályozására és megszámlálására. A mikroszkóp valós időben működik már egészen kicsi egyedszámoknál is, amely lehetővé teszi az ivóvíz folyamatos monitorozását a szabványban előírt értéken. A berendezés gyártását és forgalmazását egy hazai kisvállalat végzi.

Mélyagyi elvezetések jeleinek sokcsatornás erősítésére analóg VLSI erősítőtömböt fejlesztettek, mely zaj és egyéb paraméterei lényegesen jobbak a nemzetközi szakirodalomban található hasonló megoldásokénál. Az élőállatos kísérletek az MTA TTK Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézetével együttműködve történnek.

Kutatás-fejlesztési tevékenységek

Járműipar és közlekedés

A járműipart és közlekedést érintő technológiafejlesztéseket jellemzően a közúti és légi közlekedés eszközei és rendszerei strukturálták.

Az *intelligens jármű és közlekedési rendszerekkel* kapcsolatos kutatások a járműirányító rendszerek tervezésének integrált módszerei, a korszerű hálózati kommunikációs eljárások és kooperatív rendszerek, valamint a járműfedélzeti szabályozó rendszerek hibátűrő kialakításai és a vezetéstámogató rendszerek területén hoztak eredményeket. A kooperatív járműirányítás célja a biztonság növelésén túlmenően az üzemanyag fogyasztás és a károsanyag kibocsátás csökkentése volt. Mivel a vezető beavatkozásának módja a jármű dinamikai tulajdonságait nagymértékben befolyásolni képes, kísérletek történtek a jármű vezetője viselkedési modelljének beépítésére az irányítási algoritmusba.

A kooperatív közlekedési rendszerek és járműkommunikációs technológiák kutatás-fejlesztése terén elért eredményeik közül kiemelkedő, hogy az Intelligens Közlekedési Rendszerekkel (ITS) foglalkozó bécsi világkongresszuson a világon elsőként demonstrálták az IPv6 hálózati protokoll végponttól-végpontig történő ITS célú alkalmazhatóságát, valamint a szabványos járműkommunikációs architektúrába illeszkedő kommunikációs megoldások kiterjesztését alacsony energia igényű szenzorhálózatokra. Az itt bemutatott demonstráció hatékonyan és látványosan volt képes igazolni, hogy az úton közlekedő és szabványos kommunikációs technológiával felkészített járművek hogyan képesek a kooperatív kommunikációs technikák adta lehetőségeket a biztonságosabb és hatékonyabb energia felhasználású közlekedés javára kamatoztatni.

A repüléstechnikai kutatások sorában az ADDSAFE projekt keretében sikeresen szerepeltek az Airbus által kiírt repülőgép hibadiagnosztikai összevetésben, melynek eredményeképpen az általuk kidolgozott detektálási algoritmusokat valós személyszállító repülőgépek fedélzeti számítógépein implementálták és működésüket az Airbus repülőgép szimulátorain validálták.

A repülésben alkalmazott elektromechanikus beavatkozók (aktuátorok) kutatása területén is jelentős előrelépések történtek. Kifejlesztettek egy kisméretű, robotrepülőgépeken alkalmazható, szabályozásra és hibadiagnosztikára képes elektromechanikus aktuátort. Az ACTUATION2015 FP7 projekt keretében az UTC Aerospace céggel közösen polgári repülőgépeken alkalmazott egységekre fejlesztettek korszerű szabályozási algoritmusokat és az ezek alapjául szolgáló matematikai modelleket.

A robotrepülőgépek terén, egy világon egyedülinek számító kisméretű, redundáns, nagy megbízhatóságú avionikai rendszer hardver tesztjei is rendben lezajlottak, a berendezéssel történő első kísérleti repülések 2013-ra várhatóak. A rendszer a robotrepülőgépek közös légtérben történő integrációját hivatott előmozdítani, hasonlóan az általuk fejlesztett „látni és elkerülni” rendszerrel, mely kamera alapú megoldást nyújt a repülő eszközök biztonságos térbeli szeparációjára. Ez utóbbi témában új, hatékony algoritmusokat adtak erősen strukturált felhős égen távoli, illetve közeli repülőgépek detektálására. Az eredmény jelentőségét mutatja, hogy a pilóta nélküli repülőgépek egy kijelölt útvonalat ma már autonóm módon végig tudnak repülni csupán a fedélzeti navigációs berendezéseikre támaszkodva, ugyanakkor nem képesek érzékelni – és így elkerülni sem – a velük közös légtérben tartózkodó másik légi járművet.

Az USA Haditengerészetének Kutatási Hivatala (ONR) által finanszírozott kutatás során korszerű útvonalbecslő és ütközési valószínűség meghatározó módszerek kutatása folyik, szimulációs és valós méréseken alapuló adatok alapján. A komplett szabályozást, képfeldolgozást, navigációt és döntési folyamatokat is tartalmazó rendszer hardveres tesztjei az ONR és az USA Légierő képviselőinek jelenlétében sikeresen lezajlottak.

Termelésinformatika és logisztika

Ez irányú K+F tevékenység termelő, szolgáltató és logisztikai rendszerek tervezését és modellezését, valamint működésük digitalizálását, irányítását, és optimalizálását célozza, mégpedig üzemi, vállalati és hálózati szinten egyaránt. Olyan világszínvonalú megoldások kifejlesztésére törekszenek, melyek jól használhatók mind globalizált nagyvállalatokban, mind pedig a velük együttműködő kis- és középvállalatokban, akár szolgáltatások (*e-service*) formájában is. A témakörrel kapcsolatos alkalmazott kutatás-fejlesztés és ipari bevezetés jó része az intézetben működő *Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és -informatika Projektközpont* keretében folyik.

A legfontosabb, 2012-ben elért eredmények a következők:

A kecskeméti Knorr-Bremse gyár új összeszerelő üzeme számára kidolgoztak egy új, flexibilis gyártórendszer koncepciót, mely jelentősen kisebb helyigény mellett képes biztosítani a megfelelő gyártókapacitást.

Az RLW Navigator EU-s projekt keretében, a Jaguár cég igényeit kielégítve, nagy szabadságfokú, lézeres robotos távhegesztési probléma megoldására új modellt és algoritmusokat dolgoztak ki, melyek egyszerre kezelik a hegesztési varratok elkészítési sorrendjének és magának a pályatervezésnek a problémáit. Az új módszer ciklusidőben mérhető hatékonysága jelentősen meghaladja az irodalomból ismert algoritmusok teljesítményét. A hegesztőfej pályatervének ismeretében hatékony megoldást adtak a robot inverz kinematikai problémájára is.

Hierarchikusan szervezett, lokális keresési algoritmusokra épített útvonal- és járat tervezési rendszert fejlesztettek ki, amely egy, a mindennapi mérnöki gyakorlatban felmerülő ipari logisztikai probléma (milkrun) megoldását támogatja.

A VFF EU-s projekt során új, a szemantikus web technológiára épített adatszerkezetet alakítottak ki, mely segítségével különböző platformokon futó gyár- és gyártás-tervezési, illetve irányítási megoldások és eszközök integrálhatók. Úttörőként integráltak diszkrét esemény-orientált gyártási szimulációt ontológia alapon egyéb, gyár- és termék-tervezési, gyártási szervezatkialakítási, layout-tervezési, költségkalkulációs modulokhoz.

Logisztikai hálózatok teljesítményoptimalizálása kapcsán gyors, hatékony adatfolyam-kezelést és -modellezést segítő Java-alapú reaktív keretrendszert készítettek és logisztikai folyamatokat optimalizáló, többszintű ütemező rendszer alapjául szolgáló algoritmusokat adtak az EU által támogatott Advance projekt keretében.

Az Audi Hungaria Motorgyár részére elindult egy tervező / sorrendező egyedi megoldás fejlesztése. A 2012-es év őszén a probléma felmérésére került sor, illetve egy nagyvonalú rendszerterv készült el. A rendszer implementációja, tesztelése, és a próbaüzem a 2013-as év feladatait képezik.

Robotikai kutatásaik során a présszerszám nélküli, robotokkal végzett fém és műanyag lemezalakítási folyamatok irányításában érték el új, szabadalom-bejelentésben is megnyilvánuló eredményeket.

Az eredmények ipari felhasználása kiemelkedő vállalatoknál, úgymint az Audi Hungaria Motors Kft., Knorr-Bremse Fékrendszerek Kft., Bosch Rexroth Pneumatics Ltd., Hitachi, Gamesa, Jaguar, Palletways történik. Külön kiemelkedő a SZTAKI és a Hitachi cég több éve folyó, több, közösen benyújtott szabadalomhoz is vezető kutatás-fejlesztési együttműködése, mely most már a félvezetőiparon túl az energetikai gépek és berendezések gyártására, valamint erőművi építkezések vizuális felügyeletére is kiterjed.

Energia és fenntartható fejlődés

A fenntartható fejlődés egyik alapvető feltétele az energiatermelő, -szállító, és -átalakító rendszerek adaptálása a változó igényekhez és lehetőségekhez. E rendszerek irányítása és felügyelete területén a megújulás egyik kulcsa az informatikai eszköztár megnövelt adatfeldolgozási, -tárolási és -továbbítási kapacitása, ami az automatizálás és a hatékonyság növelése terén is új lehetőségeket nyit, valamint új problémákat vet fel. Kiemelten foglalkoznak az alábbi témákkal:

Energiatermelő rendszerek irányítása és felügyelete: 2012-ben folytatódott a Paksi Atomerőművel kapcsolatos stratégiai együttműködés. Az intézet szakértői háttérrel biztosít az atomerőmű meglévő irányítástechnikai rendszereinek felújítása előkészítésében, az erőmű üzemidő hosszabbítási projektje keretében, mely során

- felülvizsgálták a paksi Blokkszámítógép rendszert és az általuk fejlesztett Univerzális Tesztrendszert az élettartam-gazdálkodás és a hosszú távú továbbüzemeltetés feltételeinek szempontjából;
- koncepciót dolgoztak ki az erőmű irányítástechnikai rendszerei együttműködésének szabványosítására OPC Unified Architecture alapon;
- közreműködtek a hamarosan felújításra kerülő Reaktor Teljesítmény Szabályozó (RTSz) rendszer rekonstrukciójának előkészítésében, a szállítandó új rendszerrel szembeni követelmények meghatározásában;
- folytatták az erőmű Technológiai Számítógép Hálózatába csatlakozó számítógépes rendszerek adat- és hálózatbiztonsági felmérésének előkészítését;
- előkészítették az erőmű Technológiai Számítógép Hálózatába csatlakozó számítógépes rendszerek adat- és hálózatbiztonsági felmérését;
- bekapcsolódtak az erőmű bővítésének munkálataiba, az új blokkok előkészítésének irányítástechnikai szakértői feladataiba.

Nemzetközi energiaszolgáltató cégcsoport (E.ON) magyarországi hálózati karbantartási problémája kapcsán felmérték a jelenlegi tervezési és operatív irányítási gyakorlatot, új elveket fogalmaztak meg, és munkafolyamatokat dolgoztak ki a hálózati szolgáltatások hatékonyságának növelése érdekében, valamint matematikai modellezés útján előzetes számításokat végeztek a javaslatok implementálásával elérhető nyereség becslésére.

A VERYSchool EU-s projekt keretében több összetett eszközt integráló platform készül iskolaépületek energiahatékonyságának felmérésére és energiagazdálkodási intézkedéseket meghatározó döntések támogatására.

Szél erőművek felügyelete és karbantartás-tervezése: az e feladatokra fejlesztett megoldásaik ipari átvétele kapcsán oktatási tevékenységet folytattak, és egy új projekt keretében algoritmusokat dolgoznak ki nem konform állapotok és hibák detektálására, valamint előrejelzésére a GAMESA spanyol szél erőmű-gyártó részére.

Biztonság és felügyelet

A biztonság fontossága rendkívüli méretekben megnövekedett az elmúlt években. Az informatikai rendszerek jelentősen hozzá tudnak járulni a biztonság fokozásához. Az *informatikai rendszerek biztonsága* (cyber security) napjaink egyik kulcskérdésévé vált, mely a kritikus infrastruktúrák (pl. energiatermelés, közlekedés) területén is egyre nagyobb jelentőségre tesz szert.

A *távfelügyelet, távérzékelés* kutatómunka célja új tudományos módszertan bevezetése különböző forrásokból származó és különböző időléptékekkel készített 4D (tér- és időbeli) távérzékelte adatsorozatok automatikus értelmezésére, ami egyes területosztályok elkülönítésén és meghatározott objektumok és változásminták észlelésén túl lehetővé teszi a helyszínek komplex, többszintű leírását. Az elemzéshez légi fotókat, műhold felvételeket, infra és radar képeket, valamint földi és légi rögzítésű LiDAR pontfelhőket használnak fel.

2012-ben elért főbb eredményeik:

Harcászati támogatás sokszennozos hálózattal: Az Európai Védelmi Ügynökség (EDA) projektjének keretén belül passzív radar képekre sikeresen tesztelték az új objektumfelismerő eljárásukat, amely jelzett pont folyamatok (MPP) eljárásával hatékonyan tudja zajos és hiányos adatokból az alakzatok körvonalait valószínűsíteni. A harcászati védelem területén együttműködést hoztak létre ki a német Bundeswehr Egyetem pilótánélküli légi felderítéssel

foglalkozó müncheni laboratóriumával, valamint a DLR (German Aerospace Center) Oberpfaffenhofen-i laboratóriumával.

Új algoritmusokat dolgoztak ki mozgó alakzatok szegmentálására és az árnyékok kezelésére. Az ivóvíz automatikus monitorozására kifejlesztett színes digitális holografikus mikroszkópjukat (DHM) a kapcsolódó alga-klasszifikáló rendszerükkel együtt több területen bevezették. A BÁCSVÍZ kecskeméti telepein sikeresen működött a férgeket detektáló DHM berendezés. Alga egyedszámot monitorozó DHM egységek a Fővárosi Vízműveknél illetve a DRV siófoki telepén kerültek alkalmazásra felszíni vizek monitorozására. A téli Balaton mikro-élővilágának DHM-es vizsgálata jelentős médiavisszhangot keltett.

A Paksi atomerőmű technológia számítógép hálózata (TSZH) informatika biztonsági helyzetének felmérése kapcsán különféle módszertani segédleteket dolgoztak ki. Az Országos Atomenergia Hivatal felkérésére egy, a nukleáris létesítmények irányítástechnikai rendszereinek számítógépes biztonságát szabályozó útmutatót készítettek.

Hálózatok, hálózati rendszerek és szolgáltatások, a jövő internete

A terület fontossága megkérdőjelezhetetlen. Az előkészítés alatt álló Horizon 2020 (FP8) programban kiemelt terület az információs és kommunikációs technológiákkal kapcsolatos alap kutatás, így a jövő internete. Az egész témakörre jellemző a nagy komplexitású rendszerek összekapcsolt, együttes kezelése, ami egyrészt rendkívül nagy adatmennyiségek feldolgozását igényli, másrészt lehetővé teszi a kisebb, vagy nagyobb, heterogén és/vagy ad-hoc közösségek információcseréjének és közös munkavégzésének segítségét közös tudástárak kontextus-orientált létrehozásával.

A 2012-ben elért eredmények a következőkben foglalhatók össze:

Grid- és felhő-számítások:

Az FP7-es EDGI (European Desktop Grid Initiative) projekt keretében általánosan megoldották a különböző típusú grid és cloud rendszerek együttműködését.

A FP7-es SHIWA projekt keretében a különböző típusú európai tudományos workflow rendszerek együttműködését tették lehetővé.

A FP7-es SCI-BUS projekt keretében továbbfejlesztették a WS-PGRADE/gUSE portál keretrendszert és kibővítették az egyre jobban terjedő cloud rendszerek támogatásával. A rendszer hasznosulására jellemző, hogy a sourceforge-ról 1 év alatt több mint 6000 letöltés volt több mint 40 országból, és számos nemzeti grid, illetve nagy nemzetközi projekt használta fel a saját portáljuk felállításához.

A területen elért, nemzetközi szinten is kiemelkedő pozíciójuk megtartásának, valamint a növekvő hazai igények kielégítésének céljából – részben MTA-támogatással – jelentős előrelépések történtek egy felhő-rendszer kialakítására.

3D-internet: Továbbfejlesztették az intézmények közötti gyors tudásmegosztást és kollaborációját támogató VirCA (Virtual Collaboration Arena) platformot, mely képes integrálni különböző laboratóriumok valós és virtuális eszközeit és azt közös 3D immerzív virtuális térben megjeleníteni.

Extrém nagy adatok hasznosítása: milliárd oldalból álló, sok Terabyte adat kereshetőségét és újszerű, jól skálázható gépi tanulási módszerekkel történő elemzését oldották meg, illetve sok százmillió ügyfélrekord azonosság-feloldására adtak eljárásokat. E területen is jelentősek az ipari hasznosítások: ügyfélismeret (AEGON), Web analitika (archívumok, közvélemény-kutatók, piackutatás), közösségi média (Magyar Telekom, Vodafone), várostervezés és navigáció (NavNGo). A kopi.sztaki.hu plágiumkereső szolgáltatást nagy számosságú Web

adattal töltötték fel, és elosztott adatkezelési technológiát dolgoztak ki a hatékony működés érdekében.

Közösségi intelligencia és mobil internet alkalmazások: Delay Tolerant Networking (DTN) – Pocket Switched Networking (PSN) hálózati technológián alapuló, adaptív, kontextus-tudatos, „emergens interoperabilitást” támogató, kollaborációs platformot fejlesztettek ki káosz/krizismenedzsment célra. Egy kísérleti mobil alkalmazásba (PhotoFlood) beépített megoldás digitális képek és rövid videók P2P terjesztését végzi a fellelhető, közeli mobil felhasználók irányába.

b) Tudomány és társadalom

A már 18 éve üzemelő SZTAKI Szótár a leglátogatottabb magyar internetes on-line többnyelvű szótárszolgáltatás. Naponta 100–140 ezer látogató végez több mint 1–1,2 millió lekérdezést. Kifejlesztették a SZTAKI Szótár 4.0 verzióját, és installálták az új rendszer üzembeállítását lehetővé tévő, megfelelő kapacitású cloud infrastruktúrát. A megújított szótárszolgáltatás elnyerte az „eFestival 2012 Kiváló Magyar Tartalom” életmű díját.

Az intézet KOPI Plágiumkereső szolgáltatása egyre ismertebbé válik. A továbbfejlesztett verzió a felsőoktatási intézmények plágiumszűréssel szemben támasztott új igényeit is kielégíti.

GUIDE@HAND nevű új generációs mobil turisztikai rendszerüket a legkülönbözőbb területeken alkalmazzák sikerrel. Példák a rendszer alkalmazására: a Moholy-Nagy Művészeti Egyetemmel és a Petőfi Irodalmi Múzeummal együttműködésében létrehozott első magyar, okostelefonra tervezett, interaktív irodalmi séta Ottlik Géza Hajnali háztetők regénye alapján, Kassa, illetve vidéki régiók és települések (pl. Tokaji borvidék, Zemplén, Eger, stb) digitális idegenvezetése, Múzeumok Éjszakáján a helyszínek közti eligazodás segítése, Duna Múzeumban tárlatvezetés, a Kutatók éjszakáján a tervezett események bemutatása, Vodafone Majális.

Az immáron XIII. eLearning Fórum keretében lehetőséget biztosítottak a korszerű eLearning rendszerek és újszerű oktatóanyagok minél szélesebb megismertetésére a tananyagfejlesztő szakértők, valamint az oktatással és képzéssel foglalkozó szakemberek számára.

A VirCA platformot, a 3D immerzív virtuális rendszert és a 4D Stúdiót különböző célcsoportoknak mutatták be, több mint 40 alkalommal.

Az intézet a korábbi éveknél is jelentősebb mértékben járult hozzá a *Kutatók éjszakája 2012* rendezvény-sorozathoz. A tudomány társadalom iránti nyitottságát erősítették kutatóik, amikor jelentős számú tv- és rádióriportot adtak eredményeikről, és minden alkalmat megragadtak azok megjelentetésére az írott sajtóban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Nemzetközi kapcsolatok

Kiemelkedően szerepeltek az EU VII. Keretprogramjában, ahol eddig 39 támogatást nyert projektben résztvevők, 7 esetben konzorciumvezetői szerepet is ellátnak (11 más, EU-finanszírozású projektben is tagok). A programok keretében Európa legkiválóbb cégeivel dolgoznak együtt az informatika-, az autó-, az energia- és a repülőgépgyártás területéről.

Az MTA SZTAKI nagy gyakorlattal és tapasztalattal rendelkezik a gépjárműipart érintő műszaki ismeretek és az ezzel kapcsolatos kutatások és technológia fejlesztések terén. Ezen értékekre alapozva létrejött egy a vezető hazai járműipari kutatás-fejlesztésben érdekelt cégekre és egyetemi központokra támaszkodó többpólusú együttműködés, amely az

akadémiai kutatásban létrejövő elméleti eredmények gyakorlati alkalmazására és hasznosítására fókuszál. E koncepcióba illeszkedve született meg az intézet részvételével a Robert Bosch Tudásközpont (RBT), valamint a győri Széchenyi István Egyetemen a Járműipari Kutató Központ (JKK).

A 2010-ben alapított Termelésinformatika és -menedzsment Fraunhofer–SZTAKI Projektközpont eredményesen működik, részben annak révén sikerült fontos ipari partnereket szerezniük. Az együttműködés kapcsán is tovább erősödtek németországi kapcsolataik.

Egyik kiemelkedő partnerük a Hitachi Yokohama kutatólaboratóriuma.

Az intézet munkatársai eredményesen működnek a témakör legjelentősebb nemzetközi tudományos szervezetek (CIRP, IEEE, IFAC, IFIP, stb.) vezetésében és munkabizottságaiban. Számos munkatársuk tagja vezető nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának.

Az MTA SZTAKI által 2012-ben rendezett konferenciák közül leginkább a következők emelendők ki:

AIM 2012: Conference of the European Academy for Industrial Management: DET – Digital Enterprise Technology: Tools and Learning Factories, Sept. 20–23, Budapest;

MITIP 2012: The 14th Int. Conf. on Modern Information Technology in the Innovation Processes of Industrial Enterprises, Oct. 24–26, Budapest (a konferencia keretében magas rangú EU-tisztviselők információs napot („Proposers’ Day“-t) tartottak);

CogInfoCom 2012: IEEE International Conference on Cognitive Infocommunications, December 2–5, Kassa.

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, E.ON, ugyanakkor a kisvállalati résztvevők biztosítékot jelentenek arra, hogy eredményeik a lehető legszélesebb körben terjedjenek el.

Az egyetemi graduális és posztgraduális oktatást az intézet továbbra is a kutatási tevékenység fontos velejárójaként és a jövőépítés elengedhetetlen feltételeként kezeli. Rendszeres oktatási tevékenységet folytatnak a következő hazai felsőoktatási intézményekben: BME, ELTE, CORVINUS, Pannon Egyetem, PTE, ME, PPKE, CEU. Törekcsenek stratégiai partnerkapcsolataik megerősítésére, újabbak kialakítására.

Átlagosan mintegy 20 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.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2012-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 projektek főbb adatai, beleértve az intézet által a teljes időszakra elnyert támogatás mértékét is):

RLW Remote Laser Welding System Navigator for Eco & Resilient Automotive Navigator
Factories, (FP7, 295 400 €, 2012–2014)
Műszaki, gazdasági és környezeti szempontok alapján egyaránt hatékony robotos lézerhegesztési rendszerek tervezésére és működtetésre irányul a projekt, melyet az európai autópia igényei motiválnak.

PARAMTIGHT Parameterized complexity and the search for tight complexity results,
(FP7, 1 150 000 €, 2012–2016)

Cél az algoritmikusan nehéz problémák komplexitásának pontosabb megértése a paraméteres bonyolultság eszközeivel. Egyrészt annak pontos meghatározása, hogy a feladat különböző paraméterei hogyan befolyásolják a probléma megoldásához szükséges időt, másrészt olyan algoritmusok konstruálása, melyeknél a futási idő paramétereiktől való függése optimális.

INARMERA- Integrating Armenia Into Era: Information and Communication, ICT
Technologies, (FP7, 80 678 €, 2012–2014)

Az Örmény Tudományos Akadémia Informatikai és Automatizálási Kutató Intézete által koordinált projekt feladata elsősorban az intézmény (és rajta keresztül Örményország) kutatási tevékenységeinek bekapcsolása az EU-s kutatási programokba.

PROACTIVE Predictive Reasoning and Multi-source Fusion Empowering Anticipation of Attacks and Terrorist Actions in Urban Environments,
(FP7, 313 240 €, 2012–2015)

A konzorcium által kitűzött cél a városi környezetben is megbízhatóan működő, döntéstámogató és terrorista tevékenységet előrejelző szenzor-fúziós rendszer létrehozása.

NADINE New tools and algorithms for directed network analysis,
(EU FP7, 290 000 €, 2012–2015)

A projekt során kifejlesztendő adatbányászati algoritmusok célja információkereső és ajánló rendszerek támogatása, a kinyert információk rangsorolása és bizalmi szintek megállapítása.

ER-flow Building an European Research Community through Interoperable Workflows and Data
(EU FP7, 88 917 €, 2012–2014)

A projekt célja, a SHIWA (EU FP7) projektben kidolgozott workflow együttműködési technológia elérhetővé tétele négy különböző tudományos felhasználói közösség számára.

KOPFire Multi-layer, federated, elastic environment for plagiarism search service (BONFire subproject)
(EU FP7, 97 000 €, 2012–2013)

A BonFIRE projekt ún. több helyszíni felhő (cloud) federációt kutat a FIRE EU kezdeményezés keretében, amely a jövő internete hálózati alkalmazásainak, szolgáltatásainak és rendszereinek, a K+F teljes életciklusában történő kutatását foglalja keretbe.

IDGF-SP International Desktop Grid Federation – Support Project
(EU FP7, 359 575 €, 2012–2014)

Az intézet által koordinált projekt a globális kutatási e-infrastruktúrák (Desktop Grid) világméretű elterjesztésének segíti elő.

RECONFIGURE REconfiguration of CONTROL in Flight for Integral Global Upset Recovery
(EU FP7, 469 300 €, 2013–2015)

A projekt célja repülőgépek irányítására szolgáló, ún. guidance and control (G&C) technológiák kifejlesztése, melyek képesek a nem várt események automatikus kezelésére, és a repülőgép állapotának optimalására, a repülés biztonsági szintjének megtartása, sőt akár növelése mellett.

LUDUS European Network for the Sharing and Dissemination of Technologies and Knowledge in the Innovative Field of Game Based Learning
(EU SEE, 61 471 €, 2012)

A már futó projekthez csatlakozván, a projekt célja „Komoly játékok” (Serious Games) kialakítása, elsősorban gazdasági és oktatási célból.

MTA - „Big Data” Search Group
LENDÜLET (204 900 E Ft, 2012–2016)

A projekt fő célkitűzése az élet minden területét átszövő infokommunikációs technológiák, felhasználók tömegeit összekötő, szenzorokkal felszerelt mobil eszközök óriási mennyiségű adatainak elemzése, a fizikai és digitális világ között ma még meglévő választóvonal áttöréséhez szükséges teljesen új szemlélet kialakítása.

NFÜ-KMR E+GRID – Beágyazott informatikai rendszer fejlesztése energia-pozitív közvilágítás optimalására
(119 715 E Ft, 2012–2014)

A megújuló energiaforráson alapuló, kifejlesztendő rendszer a környezeti feltételekhez és a forgalmi igényekhez igazodva vezérli a közvilágítást, úgy hogy hálózati energiamérlege pozitív legyen.

NFÜ-KMR Jelnyelvi tolmácskesztyű fejlesztése
(90 000 E Ft, 2012–2014)

A projekt célja egy olyan innovatív, intelligens segédeszköz megalkotása, melynek segítségével a beszéd- és halláskárosult emberek a mindennapi életben képesek kapcsolatot teremteni ép embertársaikkal úgy, hogy az mindkét fél számára intuitív módon valósul meg.

NFÜ-KMR Cloud akkreditációs szolgáltatás indítása
(87 120, 2013–2014)

A projekt új eljárások és üzletileg hasznosítható szolgáltatás kidolgozását célozza meg.

OTKA Nagyléptékű adatok algoritmikus analízise
(69 728 E Ft, 2012–2016)

Cél mély elméleti alapokra épülő, hatékony, a kialakulóban levő elosztott infrastruktúrákat kiaknázó megoldások kutatása, kidolgozása.

OTKA Polinomiális nemlineáris rendszerek analízise és irányítása optimalizálási módszerek segítségével
(50 576 E Ft, 2012–2016)

A projekt célja új modell-analízis, identifikációs és szabályozótervezési eljárások kifejlesztése nemlineáris dinamikus rendszerekhez a kvázi-polinomiális (QP) és determinisztikus kinetikus rendszerek speciális algebrai tulajdonságainak felhasználásával.

OTKA Figyelmi fókuszterület megtalálása véletlen szenzor hálózatban
(32 994 E Ft, 2013–2016)

A projekt célja annak kimutatása, hogy a hálózatba szervezett szenzorokkal sűrűn ellátott környezetekben az információ begyűjtésére és kiértékelésére elegendő, ha vannak olyan érzékelők, amik eleve olyasmire figyelnek, ami arra érdemes, és ha ezt többen teszik és egy részük ugyanazt a területet/eseményt figyeli, akkor ott kell lenni valami fontosnak, amiről ezután modell, vagy részletes megfigyelés is készülhet.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Könyvek

1. Kecskeméti G: Foundations of Efficient Virtual Appliance Based Service Deployments: New Techniques for Virtual Appliance Delivery and Size Optimization in Infrastructure as a Service Clouds. LAP Lambert Academic Publishing, Saarbrücken, 208p. (2012)
2. Keviczky L, Bányász Cs: Két-szabadságfokú irányítási rendszerek. Győr: Universitas-Győr Nonprofit Kft, 420p. (2012)
3. Rödönyi G: Structured uncertainty modelling for robust control: iterative design for linear systems. LAP Lambert Academic Publishing, Saarbrücken, 172p. (2012)

Folyóirat-publikációk

4. Balló G, Hangos KM, Petz D: Convex optimization-based parameter estimation and experiment design for Pauli channels. IEEE Transactions on Automatic Control, 57(8) : 2056-2061 (2012)
5. Benedek Cs, Descombes X, Zerubia J: Building development monitoring in multitemporal remotely sensed image pairs with stochastic birth-death dynamics. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 34 (1): 33-50 (2012)
6. Bulatov AA, Dalmau V, Grohe M, Marx D: Enumerating homomorphisms, Journal of Computer and System Sciences, 78 (2): 638-650 (2012)
7. Egri P, Váncza J: Channel coordination with the newsvendor model using asymmetric information. Int. J. of Production Economics, 135 (1): 491-499 (2012)
8. ElMaraghy W, ElMaraghy H, Tomiyama T, Monostori L: Complexity in engineering design and manufacturing. CIRP Annals-Manufacturing Technology, 61 (2): 793-814 (2012)
9. Farkas Z, Kacsuk P: Evaluation of hierarchical desktop grid scheduling algorithms. Future Generation Computer Systems, 28 (6): 871-880 (2012)
10. Földesy P: Terahertz single-shot quadrature phase-shifting interferometry. Optics Letters, 37 (19): 4044-4046 (2012)
11. Gáspár P, Szabó Z, Szederkényi G, Bokor J: Design of a two-level controller for an active suspension system. Asian Journal of Control, 14 (3): 664-678 (2012)
12. Gerencsér L, Orlovits Zs: Real time estimation of stochastic volatility processes. Annals of Operations Research, 200 (1): 223-246 (2012)
13. Hangos KM, Szederkényi G: The underlying linear dynamics of some positive polynomial systems. Physics Letters A, 376 (45): 3129-3134 (2012)

14. Ivanyos G, Karpinski M, Rónyai L, Saxena N: Trading GRH for algebra: Algorithms for factoring polynomials and related structures. *Mathematics of Computation*, 81 (277): 493-531 (2012)
15. Ivanyos G: Finding hidden Borel subgroups of the general linear group. *Quantum Information & Computation*, 12 (7-8): 661-669 (2012)
16. Kacsuk P, Farkas Z, Kozlovszky M, Hermann G, Balaskó Á, Karoczkai K, Márton I: WS-PGRADE/gUSE generic DCI gateway framework for a large variety of user communities. *Journal of Grid Computing*, 10 (4): 601-630 (2012)
17. Kim H, Sah MP, Yang C, Roska T, Chua LO: Memristor bridge synapses. *Proceedings of the IEEE*, 100 (6): 2061-2070 (2012)
18. Kis T, Kovács A: A cutting plane approach for integrated planning and scheduling. *Computers and Operations Research*, 39 (2): 320-327 (2012)
19. Kovács A, Szirányi T: Harris function based active contour external force for image segmentation. *Pattern Recognition Letters*, 33 (9): 1180-1187 (2012)
20. Mészáros Cs: Regularization techniques in interior point methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 236 (15): 3704-3709 (2012)
21. Nonaka Y, Erdos G, Kis T, Nakano T, Vancza J: Scheduling with alternative routings in CNC workshops. *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 61 (1): 449-454 (2012)
22. Sipos G: Protecting the consistency of workflow applications in collaborative development environments. *Future Generation Computer Systems*, 28 (3): 500-512 (2012)
23. Szederkényi G, Banga JR, Alonso AA: CRNreals: a toolbox for distinguishability and identifiability analysis of biochemical reaction networks. *Bioinformatics*, 28 (11): 1549-1550 (2012)
24. Szolgay D, Szirányi T: Adaptive image decomposition into cartoon and texture parts optimized by the orthogonality criterion. *IEEE Transactions on Image Processing*, 21 (8): 3405-3415 (2012)
25. Tapolcai J, Pin-Han H, Rónyai L, Bin W: Network-wide local unambiguous failure localization (NWL-UFL) via monitoring trails. *IEEE-ACM Transactions on Networking*, 20 (6): 1762-1773 (2012)
26. Yasseri T, Kornai A, Kertész J: A practical approach to language complexity: a wikipedia case study. *Plos One*, 7 (11): 1-8 (2012)
27. Zarándy Á, Fülöp T: Approaching object detector mouse retina circuit model analysis and implementation on cellular sensor-processor array. *International Journal of Circuit Theory and Applications*, 40 (12): 1249-1264 (2012)

**AZ MTA SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2012-BEN**

Főbb mutatók 2012-ben

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	280	Ebből kutató ² :	127	
PhD, kandidátus:	59	MTA doktora:18	Rendes tag és levelező tag:	5
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			6	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			55	

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	303		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	301		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	4		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	10		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	82		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	69		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	2
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 4	idegen nyelven:	7

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	108,094	Összes független hivatkozás száma:	1297
Összes hivatkozás száma ⁸ :	1475		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	2	MTA doktora:	1
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	224		
	poszterek száma:	10	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	48	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	43
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	2		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	48		
Témavezetések száma: TDK munka:	26	Diplomamunka (BSc):	54
Diplomamunka (MSc):	33	PhD:	54

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	1044 862	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	15	Teljes saját bevétel:	2045 642	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		14		
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	78 599	E Ft		
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		7		
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	271 820	E Ft		
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		40		
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	756 950	E Ft		
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		1		
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	33 702	E Ft		
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	972 939	E Ft		

Részletezett pénzügyi adatok 2012-ben

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	1044 862	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	2045 642	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	78 599	E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	271 820	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	73 049	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	683 901	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	33 702	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	261 596	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	63 719	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	373 316	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	274 308	E Ft

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.; 1525 Budapest, Pf. 17.
telefon: (1) 438 1130; fax: (1) 438 1147
e-mail: szepvolgyi.janos@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2012-ben

Az MTA TTK megalakulásával egy olyan multidiszciplináris alapokon szervezett kutatóhely jött létre, ahol a művelt tudományterületek között – az egy szervezeten belüli működés következtében – könnyen továbbfejlődhetnek az érintett intézetek között már meglévő kutatói együttműködések, ugyanakkor több témában új közös kutatások is elindulhattak.

E kezdeményezéseket a TTK vezetése mind gazdálkodási, mind tudományszervezési oldalról igyekezett támogatni. A konkrét együttműködésekről és azok eredményeiről intézetenkénti bontásban, az alábbiakban számolunk be.

TTK AKI

Az intézet a korábbiakban is fontosnak tartotta a különböző akadémiai intézetek közötti együttműködések. E törekvések a Természettudományi Kutatóközpont létrejöttével, majd az intézeti szervezet stabilizálásával még kiterjedtebbé váltak. A jelenlegi és a jövőbeli közös kutatási eredmények alapjául szolgál, hogy az MTA TTK intézeteinek kutatói különböző iskolákból nőttek ki, ismereteikkel hasznosan kiegészítik egymást, és a rendelkezésre álló többféle módszerrel a megoldandó problémákat komplexen, esetenként multidiszciplinárisan tudják megközelíteni.

A tárgyévben az alábbi témákat művelték a TTK intézeteivel együttműködve:

A SzKI-ben előállított, heteroatomot tartalmazó polimer kotérhálók termikus stabilitását jellemezték az intézetben. Az eredményekről a tárgyévben publikáció jelent meg.

Alumínium/kerámia kompozitok kifejlesztésén dolgoznak az MFA-val közösen. A cél a féktárcsák kopásállóságának a csökkentése. A projektben az intézet a próbatestek szinterelését végzi.

Mikrohullámú elnyelésű társított kerámia anyagokat fejlesztenek ki. A munkához az MFA a NiZn-ferrit porok préselésével járul hozzá.

Az SzKI kutatóival közös NKFP-pályázatban, vizes közegben fokozatosan hidrolizáló, L-almasav alapú, komonomerként speciális tulajdonságú (pl. antibakteriális hatású) poliésztereket állítottak elő. Az anyagokat közösen jellemezték, és vizsgálták felhasználási lehetőségeiket. Az eredmény alapján szabadalmi bejelentés és kozmetikai ipari termék készült.

Az AKI Felületmódosítás és Határfelületek Osztálya és az MFA Mikrotechnológia Osztálya között együttműködés alakult ki a lágylitográfiai módszerek közé tartozó mikrokontaktmásolás témában. Az MFA-ban fotolitográfias módszerekkel előállított szilícium mestermintázatok alapján készült, a mikrométer alatti tartományban strukturált felületeket az intézetben adott mintázatú, heterogén fehérjerégegek enzim-hatásra történő változásának vizsgálatára alkalmazzák.

Az SzKI kutatóival közösen hexagonális és monoklin szerkezetű WO_3 fotokatalitikus tulajdonságait vizsgálták összefüggést keresve a katalitikus tulajdonságok és a szerkezeti jellemzők között. Az 1H MAS NMR vizsgálatokkal megállapítható volt az ammónium csoportok jelenléte a mintákban. Az eredményből a tárgyévben publikáció született.

A 2012-ben elnyert OTKA-pályázatok keretében az alábbi három témában kezdődött közös tevékenység:

Funkcionalizált nanorészecskéken alapuló multiszenzorokat fejlesztenek ki és ezekre alapozva bioanalitikai eljárásokat dolgoznak ki. Az MFA Mikrotechnológia Osztályán meglévő szenzorstruktúra kialakítási tapasztalat és gyakorlat, valamint AKI Felületmódosítás és Határfelületek Osztályán rendelkezésre álló elektrokémiai háttér jó alapot nyújt a közös munkához.

Bioaktív, csontpótlásra alkalmas hidroxapatitok szilárdságának növelési lehetőségeit vizsgálják különböző erősítőfázisok hozzáadásával. Az MFA-val közösen az intézet a nano-hidroxapatit alapú minták hőkezelését végzi.

Lipid jellegű molekulákból víz-levegő határfelületen Langmuir molekuláris filmek készítésének tanulmányozása, majd a megfelelő paraméterek kiválasztása után a molekuláris rétegek szilárd hordozóra történő átvitele az intézet munkatársainak feladata. A lipidszerkezetet az MFI-ben röntgen- és neutronszórással tanulmányozzák, hogy annak belső mobilitásáról szerezzenek ismereteket. Ezzel segítik a sejtmembránok szerkezetének, működésének megértését és modellezését. A strukturális változások térbeli és időbeli követésével gyógyszermolekulák sejtbe juttatási lehetőségeit igyekeznek feltárni.

Jelenleg tervezik az MFI-vel közösen a „Nanopórusos szilikátok megfelelő hordozók bioaktív molekulák tárolására és kontrollált kibocsátására” című témát. A különböző módosítási eljárásokkal előnyösen lehet befolyásolni a gyógyszer hatóanyagok szervezetbe juttatását. A Gyógyszertranszport és Toxicitási Laboratóriummal együttműködve az intézetben előállított nanopórusos szilikát alapú készítmények biokompatibilitását, toxicitását tervezik tesztelni.

Rendelkezésre állnak olyan ismeretek, melyek további lehetőséget jelentenek a TTK intézeteinek jövőbeni közös kutatásaira, illetve eredményeiknek valamilyen termékben történő megtestesülésére:

A korábban kifejlesztett, szilícium-oxid alapú, késleltetett hatóanyag leadást biztosító gyógyszerhordozó a későbbiekben más hatóanyaggal is alkalmazható.

Orvostechikai (kontrollált hatóanyag leadás) felhasználásra alkalmas funkcionális polimereket dolgoznak ki.

Gyógyszerek csomagolására alkalmas kompozit anyagokat fejlesztenek ki.

Az intézet havi rendszerességgel szemináriumokat tart, melyek nyitottak, azon szívesen látják az érdeklődőket az MTA TTK többi intézetéből is.

Az intézet már négy alkalommal rendezett kutatótábort a kémia iránt érdeklődő tehetséges középiskolás diákoknak. A második évtől a kutatótábor kilépett az intézet keretei közül, és azóta az MTA KK intézetei, ill. az MTA TTK kémiai intézetei részvételével szervezi a kutatótáborokat. Az évekkor elelőtt még középiskolás diákok ma már egyetemistaként járnak vissza az intézetekbe nyári gyakorlatokra, valamint tudományos diákköri munka végzésére.

TTK EI

A *Membránfehérje Bioinformatika Munkacsoport* 2012 júliusában alakult, miután a csoportvezető az Akadémia elnöke által létrehozott Lendület pályázatot nyert. A csoport megalakulása részben átszervezéssel, a Fehérjeszerkezet munkacsoportból érkezett, részben új munkatársak felvételével történt. Mind a csoport által végzett laboratóriumi és elméleti munka egy része a kutatóközponton belüli együttműködés segítségével valósul meg. A laboratóriumi munkák a Membránfehérje munkacsoporttal együttműködve, az elméleti munkák egy része a csoportvezető korábbi csoportjával való együttműködésben valósul meg. Ez utóbbi munkából már egy cikk is született.

Az Enzimológiai Intézet *Sejt Architektúra Munkacsoportjának* kapcsolata a Központi Kémiai Kutatóintézettel (mai nevén: Molekuláris Farmakológiai Intézet, Szerves Kémiai Intézet)

hosszú múltra tekint vissza, mivel „Az életminőség javítása” című Nemzeti Kutatás és Fejlesztés MediChem projektben 2001–2006 között ideális lehetőséget biztosított a konzorciumban résztvevők közötti kollaborációra. A gyógyszerkutatás-orientált projekt első periódusában a munkacsoport egy új rákellenes molekula, a KAR-2 molekuláris mechanizmusát azonosította, míg a második periódus legjelentősebb eredménye egy, a csoport által akkor felfedezett és azonosított agy-specifikus fehérje szerkezeti jellemzése volt. A konzorcium keretében kapott kutatási eredmények nemzetközi folyóiratokban kerültek publikálásra.

A Tubulin Polymerization Promoting Proteinnek (TPPP/p25) elnevezett rendezetlen szerkezetű fehérje felfedezését követően 2004-ben az immun-hisztokémiai vizsgálatok alapján bebizonyosodott, hogy bizonyos neurológiai rendellenességek kialakulásának részese a fehérje. Következésképpen a csoport központi témájává vált napjainkig a TPPP/p25 sokszínű sajátságainak kutatása. A TPPP/p25 idegrendszeri relevanciája eredményeképpen a TTK Molekuláris Farmakológiai Intézetének igazgatójának javaslatára a Sejt Architektúra csoport előadása közös, neurológiai témájú szekcióba került, ami a két intézet közötti lehetséges kollaborációs munka kialakulását vetíti előre.

A genomiális DNS metilációs mintázatának vizsgálatára indult közös munka még 2011-ben az Aktív Transzportfehérjék munkacsoport és a Genom Stabilitás munkacsoport vezetője, ill. a Gyógyszer-kölcsönhatások laboratórium tudományos főmunkatársának (MTA Kémiai Kutatóközpont) részvételével. A kísérletek 2012-ben az egyesült kutatóközpont keretein belül folytatódtak. Az Enzimológiai Intézetben előállított biológiai minták tömegspektrometriás elemzését a Molekuláris Farmakológiai Intézet Biokémiai Farmakológiai osztálya végzi. A közös munkából 2012-ben megjelent egy közlemény az *Epigenetics* folyóiratban. A további kutatás elősegítése érdekében az érintett kutatók pályáztak egy új tömegspektrométer műszerre az MTA műszerpályázatán, de sikertelenül.

A csoport folytatta az MDR-szelektív vegyületek fejlesztésére irányuló kutatásait. Kiemelkedő jelentőségű fejlemény, hogy 2012 januárjában elindult az ERC Starting Grant pályázat. 2012-ben számos új MDR-szelektív vegyületet azonosítottak; felállították a nagy áteresztőképességű szkrín futtatására alkalmas HTS labort; ígéretes kísérleteket végeztek egyes MDR-szelektív vegyületek *in vivo* hatásának igazolására. Kihasználták a Természettudományi Kutatóközpontban megjelenő szinergiákat, és együttműködést kezdtek a Szerves Kémiai Intézet, Organokatalízis Laboratóriumával.

Részletesen vizsgálták az ABCB6 fehérje sejten belüli lokalizációját. A TTK Molekuláris Farmakológiai Intézettel közösen megállapították, hogy az ABCG2 megjelenése a vörösvérsejtek membránjában korrelál farmakológiailag releváns polimorfizmusokkal.

Nemzetközi együttműködésben folytatták az antimaláriás gyógyszerekkel szemben kialakuló rezisztencia molekuláris alapjainak vizsgálatát.

A *Szerkezeti Biofizika Munkacsoport* együttműködést alakított ki az MTA TTK Szerves Kémiai Intézet Fehérjekrisztallográfiás Kutatócsoportjával. A munkacsoport által enzimológiai és fehérjekémiai módszerekkel vizsgált 3-izopropilmalát dehidrogenáz (IPMDH) enzim és annak mutánsai nagyfelbontású térszerkezetének meghatározását a Szerves Kémiai Intézet Fehérjekrisztallográfiás Kutatócsoportjának egy tudományos munkatársa végzi a Molekuláris Farmakológiai Intézet központi Fehérje laboratóriumában.

A genom metabolizmus és DNS-javítás területeken olyan kutatási irányok indultak, melyek a kémiai biológia és a fejlődésbiológia módszertanait használják. Ezen belül közvetlen tömegspektrometriai kutatások indultak el a Szerves Kémiai Intézettel együttműködésben a *Staphylococcus aureus* patogenicitási szigeteinek repressziós és de-repressziós mechanizmusaiért felelős fehérje-fehérje komplexek vizsgálatában.

Elnyertek és sikeresen üzembe állítottak egy műszeregyüttest, amely segítségével a XXI. századnak megfelelő infrastruktúrával vizsgálhatók szerkezeti biológiai kérdések a TTK-ban.

TTK KPI

A KPI kutatásainak együtteséből az intézet Összehasonlító Pszichofiziológiai Kutatócsoportjának tematikája illeszkedik a Természettudományi Kutatóközpont egyéb intézeteinek tudományterületeihez. E kutatócsoport együttműködést alakított ki a *Molekuláris Farmakológiai Intézettel* az alábbi témákban:

Az intrinsic optikai jel kérgi eredetének vizsgálata.

A kérgi és hippokampális serkenési és gátlási folyamatok vizsgálata *in vitro* körülmények között.

E témakörök elsődlegesen „felfedező” jellegűek. A vizsgálatokban résztvevő kutatók közösen nyújtottak be Európai Unió (FP7) pályázatot, és együtt szerepeltek akadémiai infrastrukturális pályázaton.

A *Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézettel* az alábbi témákban jött létre együttműködés: Fluidikai funkcióval ellátott agyi elektródok tervezése.

Mély agyi elektródok tervezése.

Agyi elektródok implantációjának vizsgálata.

Az elektród impedancia csökkentésének kutatása.

E témakörök elsődlegesen műszaki fejlesztés jellegűek. A vizsgálatokban résztvevő kutatók közös TÁMOP (KTIA) pályázatot nyújtottak be.

A Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet döntési elmélettel foglalkozó kutatócsoportja szakértőként meghívta munkatársunkat a kutatómunka belső értékeléséről tartott ülésére.

A Kutatóközpont két közös rendezvényt tartott, melyeken a KPI is bemutatta kutatásait a Kutatóközpont munkatársainak. Az egyik a Mátraházán a fiatal kutatók vizsgálatait bemutató rendezvény volt, a másik a Kutatóközpont tudományos előadássorozata. Mindkét esetben tapasztalhattuk a Kutatóközpont munkatársainak komoly érdeklődését.

A KPI – a kutatóközpontok kialakítási elveinek megfelelően – az együttműködési törekvések mellett megőrizte diszciplináris autonómiáját. Gazdálkodása ugyanakkor beolvadt a Kutatóközpont működésébe. A Kutatóközpont gazdasági vezetése két kihelyezett munkatársat biztosított a KPI-nek. Feladatuk igen sokrétűnek bizonyult, de munkájuk biztosította a koordinált működést. A 2012. év a gazdálkodás tekintetében egyrészt a tapasztalatszerzés éve volt, másrészt annak a várhatóan két és fél évnek az egyike, mely az átmenetet jelenti az önálló gazdálkodás és a „Q2 épület” egységesebb gazdálkodása között. A KPI-ben kialakult álláspont szerint a jelenlegi gazdálkodási rendszer nem tekinthető statikus állapotnak, hanem az átmenet dinamikájának része. Ennek megfelelően – legalább is a KPI esetében – fokozatosan csökkenteni kellene a központi telephelyen elhelyezkedő intézetek és az azon kívüli KPI adminisztrációja közötti eltéréseket. Ezt az is indokolja, hogy az a gazdasági munkatárs, akinek jelentős gyakorlata volt szervezési, pályázati és tervezési kérdésekben, decemberben távozott a Kutatóközpontból.

A KPI munkatársai kompetenciájuk határain belül igyekeztek maximálisan részt venni az épület laboratóriumainak kialakításában. A számunkra nyújtott lehetőségek mellett konzultáltunk a tervezőkkel, és igyekeztünk érvényre juttatni a kutatásaink szempontjából lényeges kialakítás szempontjait.

TTK MFI

A 2012. esztendőben megkezdődött a kutatások fókuszált területekre történő összpontosításának és az ehhez szükséges kritikus tömeg megteremtésének ösztönzése, melynek célja stratégiai partnerség kialakítása a gyógyszeriparral. Ennek érdekében új technológiai platformok jöttek létre, amelyek a következők: 1) új kutatási infrastruktúra, az optofiziológia; 2) gyógyszerek és különböző toxikus anyagok hatásainak *in vivo* monitorozására alkalmas transzgenikus modell organizmusok létrehozása és alkalmazása, valamint 3) nanoanyagok toxicitásának rendszerszerű vizsgálata. A Molekuláris Farmakológiai Intézet meglévő kompetenciái és az általa kezdeményezett új technológiai platformok lehetővé teszik az MTA TTK-ban előállított, humán terápiás és diagnosztikai potenciállal rendelkező új molekulák és funkcionális anyagok tervezését, az előállított anyagok hatásának értékelését *in vitro*, *ex vivo* és *in vivo* biológiai vizsgálatokban.

A 2012. esztendőben megkezdődött a nemzetközileg kiemelkedő színvonal fokozása a sejtbiológiai alapkutatások területén. Ennek megfelelően, 2012 júliusában megalakult a Molekuláris Sejtbiológiai Laboratórium, miután a laboratórium vezetője az Akadémia elnöke által létrehozott Lendület pályázatot nyert. A csoport megalakulása új munkatársak felvételével történt. A munka - amelyből már egy cikk is született -, főként a Molekuláris Farmakológiai Intézet különböző laboratóriumai közötti együttműködés segítségével valósul meg.

A 2012. esztendőben megkezdődött a graduális és posztgraduális kutató-képzés kiválósági központ fejlesztésének elősegítése az Eötvös, a Műszaki és a Semmelweis egyetemekkel együttműködve. A célkitűzés megvalósítását szolgálták a Molekuláris Farmakológiai Intézet gyakorlati képzésében résztvevő diplomamunkások (14/2012) és PhD hallgatók (23/2012), a Molekuláris Farmakológiai Intézet kutatóinak részvétele a graduális és posztgraduális oktatásban (ELTE, BME, SOTE), a „Molekuláris Farmakológiai Szemináriumok” sorozat neves külföldi és hazai előadókkal, az angol nyelven tartott „Journal Club”, az Enzimológiai Intézettel közösen szervezett „Immunkávé” előadások a kiemelkedő eredmények ismertetésére, a Molekuláris Farmakológiai Intézet fiatal kutatói részvételének szorgalmazása az MTA TTK „Doki Suli”, a Kutatóközponti Szakmai Napok, a Gárdos Symposium, a Kutatók Éjszakája, a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvényeken, valamint hazai és külföldi konferenciákon.

Az MTA TTK szintű integráció eddigi eredményeiként számos közös publikáció jelent meg (KPI, EI), közös MTA Műszerpályázatok összintézeti együttműködésben, továbbá EU FP7 pályázatok (ERC Synergy Optophysiology) kerültek benyújtásra a KPI, MFA, AKI, SZKI kutatóhelyek részvételével. Közös előadás és szeminárium sorozatok indultak az EI közreműködésével. Egyes Molekuláris Farmakológiai Intézeti kutató laboratóriumok magas szintű szolgáltató tevékenységet is végeztek (bioMS, hatás vizsgálat, vizsgálati modellek, gyógyszer-hordozók, központi Fehérjelabor infrastruktúra), ami elősegítette a Molekuláris Farmakológiai Intézeten belüli, valamint az MTA TTK centrumon belüli (EI, AKI, SZKI), továbbá a gyógyszeripari és biotechnológiai együttműködéseket.

TTK MFA

Az MFA, mint multidiszciplináris rendszerintegrátor, a korábbi évekhez hasonlóan az MTA TTK-ban is érdekelt az intézetközi együttműködésekben. Értelemszerűen az anyagtudományi kutatások területén alakult ki szerves kapcsolat (AKI), de az MFA multidiszciplináris kutatásaiban az MFI, EI, KPI együttműködések is szerepet játszanak.

A Nanoszerkezetek Osztály az MFI-vel a koordinációjukkal benyújtott ERC Synergy pályázatokban a Fotonika Osztállyal együtt:

A 2012-es, nem támogatott pályázat címe: „*Complex estimation of the toxicological effects of nanomaterials*”,

A 2013-ban benyújtott, elbírálás alatt lévő pályázat címe: „*Generation of a Novel Nanosensor Platform for In Vivo Optical Monitoring of Physiological Ion and Solute Fluxes*”.

Együttműködtek a lepkeszárnyakban előforduló fotonikus nanoarchitektúrák gáz/gőz-érzékelési tulajdonságainak kutatásában.

A Fotonikai Osztály elektrokémiai felületmódosítások vizsgálatára az AKI-vel egy QCM-D (quartz crystal microbalance) eszközre pályázott MTA Infrastruktúra pályázaton, sikertelenül. A Nanobioszenzorikai Lendület-Csoport az EI-vel folytat sikeres receptor-fejlesztést a nagyérzékenységű jelölésmentes bioérzékelő kutatásban biomolekulák protein adszorpciós és affinity binding kötésében.

A Mikrotechnológiai Osztályon több közös munka folyik a TTK társintézményeivel, a közös K+F munkákat többnyire az MFA-ban folyó mikrotechnológiai és a mikrofluidikai kutatásokat bemutató előadás inicializálta.

Az MFI-vel közösen „The dynamic connectome project: reverse-engineering the structure and information processing algorithms of neuronal networks” DYNCONN címmel FET Open pályázatot adtak be, melyben az MFA *in vitro* elektrodák hálózat és mikrofluidikai környezet kialakítását végzi idegszövetek működésének és a kapcsolatok fejlődésének kutatására. A 2012-ben sikertelen pályázatot idén tavasszal újra beadják.

A KPI-vel együtt az MFA új típusú eltemetett csatornás agyi mikroelektroda struktúrák *in vivo* tesztelése folyik.

A KPI-vel közösen folyik a mikroECoG elektródák (agyfelszínre közvetlenül ráültethető, polyimid fólia felületén kialakított elektródahálózat) fejlesztése és validálása.

A KPI-vel és AKI-vel közös, „Multifunkcionális mikrorendszerek fejlesztése *in vitro* és *in vivo* idegtudományi és orvosbiológiai célokra” c. KTIA AIK pályázatuk jelenleg bírálat alatt.

Az AKI-vel közösen fejlesztenek:

gázérzékelő struktúrákhoz nano-részecskékkel érzékenyített katalizátoranyagokat mikroszenzor alkalmazásra

mikrofluidikai elektrokémiai cellákat üveg-PDMS rendszerben

mikroelektrodahálózatot és cellákat sejtenyészetek vizsgálatára

üveg hordozón arany struktúrák kialakítása gázérzékelő célokra.

A Komplex rendszerek Osztálya próbált együttműködést kezdeményezni a KPI-vel az „Együttműködés és Versengés” témakörében.

A Vékonyréteg fizikai Osztály az SZKI-vel közösen egy atomi szerkezet-meghatározási PhD kutatást kívántak indítani, amiben új eredményeket a röntgen diffrakció és elektron diffrakció módszerek kombinálásával reméltek. Közös MTA Infrastrukturális pályázatuk a precessziós rendszerre nem nyert támogatást.

A Kerámia és nanokompozitok Osztály az AKI-vel nanokerámia K+F-ben működött együtt hazai és nemzetközi (OTKA, HM/FOI) projektekben a nanoszerkezetű kerámiatestek plazmaszinterelésének vizsgálatára, különös tekintettel a speciális magas hőmérsékletű és orvosbiológiai tulajdonságok kutatására.

TTK SZKI

A TTK év elején történt megalakulása óta az SZKI minden kutatóegysége elsődleges célul tűzte ki az együttműködések kezdeményezését és fenntartását a központ többi intézetével. Az SZKI tevékenységének jellegéből eleve adódik a kooperáció lehetősége:

a szintetikus kémiai laboratóriumok modell vegyületeket állítanak elő különböző tesztelések és mérések céljára, valamint az együttműködő intézet által javasolt szintéziseket végzik el, a polimerkémiai laboratórium új típusú anyagok előállításával az anyagtudomány számára szolgáltat értékes termékeket,

a műszeres szerkezetkutató egységek speciális szerkezet-meghatározási lehetőséget kínálnak az együttműködő partnerek számára,

az Elméleti Kémiai Csoport a TTK-ban egyedülálló módon foglalkozik kvantumkémiai és egyéb elméleti számításokkal, melyek szervesen egészítik ki a teljes központ kutatásait.

Néhány ilyen együttműködés már korábban kialakult, így pl. a 2000 és 2006 között megvalósult, az akkori NKTH által támogatott MEDICHEM programban a mai SZKI, MFI és EI egyaránt részt vett. Hasonlóképpen többéves együttműködés áll fenn az egykori Kémiai Kutatóközponton belül a mai MFI és SZKI között.

A tárgyévben a következő élő kooperációkról kell beszámolni:

Molekuláris Farmakológiai Intézet

A Gyógyszertranszport és Toxicitás Laboratórium és az SZKI Heterociklusos Kémiai Laboratóriuma közösen vizsgálta az központban szintetizált új fenotiazin-származékok multidrog-rezisztencia-gátló tulajdonságát és a vegyületek toxicitását. A napi kapcsolatra épülő együttműködés közös (egy megjelent és egy megjelenés alatt álló) publikációkhoz vezetett.

A Molekuláris Idegtudományi Laboratórium az SZKI Szénhidrátkémiai Laboratóriumával együtt vettek részt értékes projektben: neurokémiai fontosságú dendrimerek szénhidrát-komponenseinek szintézisében.

A Lézerspektroszkópai Laboratórium sikeres együttműködést valósított meg az SZKI Szénhidrátkémiai és Heterociklusos Kémiai Laboratóriumaival. E kooperáció keretében heterogyűrűs származékok fluoreszcens tulajdonságát kutatták. Az eredményekből két közös publikáció jelent meg 2012-ben.

A Kémiai Farmakológiai Laboratórium kimagasló jártasságra és szakértelemre tett szert a királis elválasztás területén, mellyel az SZKI Heterociklusos Kémiai és Organokatalízis Laboratóriumok kutatásaihoz jelentősen járult hozzá. Így valósult meg az enantiomer-tiszta N-hidroxibutilfenotiazinok izolálása is, melyet leíró közlemény a közeljövőben jelenik meg.

Enzimológiai Intézet

Élő, napi kapcsolat fejlődött ki 2012-ben a Lendület programos membránfehérjékkel foglalkozó laboratórium és az SZKI Organokatalízis Laboratórium között. Az SZKI kutatóegységében szintetizált vegyületeket a membránfehérje laboratórium állatkísérleteinél használja fel.

Az intézet több kutatóegysége végez közös kutatásokat az SZKI Röntgen Egykristály laboratóriumával a szerkezet-meghatározás területén.

Összefoglalva megállapítható, hogy az SZKI sokrétű együttműködések alakított ki a TTK más intézeteivel, melyeknek keretében elsősorban új anyagok szintézisével és szerkezetvizsgálattal járul hozzá a társintézetek kutatásaihoz. A rendszeresen megrendezésre kerülő Szerves Kémiai Szemináriumok, melyekre a teljes kutatóközpont megkapja a meghívást, kitűnő fórumot biztosítanak arra, hogy az SZKI-ben folyó kutatási irányokat a társintézetek megismerjék, és ezzel tovább szélesedő, központon belüli együttműködés valósuljon meg.

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67; 1525 Budapest, Pf. 17.

telefon: (1) 438 1130; fax: (1) 438 1147

e-mail: szepvolgyi.janos@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az intézet fő feladata 2012-ben magas színvonalú kémiai és interdiszciplináris kutatások végzése volt az anyagtudomány és anyagtechnológia, valamint a környezeti kémia kiemelt területein. Kutatómunkájukban a felmerülő tudományos kérdésekre komplex módon, többféle elméleti, kísérleti és vizsgálati módszer együttes alkalmazásával keresték a válaszokat.

A kutatási témák kiválasztásakor kiemelt figyelmet fordítottak a tudományos újszerűség mellett a gyakorlati vonatkozásokra is. Több témájukban az anyagtudományi és a környezetkémiai vonatkozások együttesen jelennek meg.

Anyagtudományi kutatásaikban a szerkezeti anyagok kémiai és szerkezeti jellemzőinek meghatározása, a kialakulásukhoz vezető folyamatok tanulmányozása mellett foglalkoztak különleges funkcionális anyagok előállításai módszereinek és alkalmazási lehetőségeinek kutatásával.

Környezetkémiai kutatásaikban a környezeti károk megelőzésére, illetve felszámolására alkalmas eljárások kifejlesztésére összpontosítottak, összekapcsolva ezt a melléktermékek és hulladékok értékes termékekké történő átalakításával. Fontos tématerület az intézetben a megújuló energiaforrások, valamint az újszerű energiátárolási és hasznosítási eljárások kutatása is.

Az intézet intenzív kapcsolatokat tart fent a hazai oktatási intézményekkel, munkatársai mind a graduális, mind a posztgraduális képzésben részt vesznek. Ezen túlmenően a BME-n és a Pannon Egyetemen kihelyezett kutatási részlegeket működtetnek.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Felületmódosítás plazmakémiai módszerekkel

Plazma-alapú ionimplantációval módosított PET és PA6 műszaki polimereken mélységfüggő kémiai változásokat észleltek, illetve javulást tapasztaltak a csúszósurlódási tulajdonságokban. Poláris funkciós csoportokat alakítottak ki dielektromos akadálykiszűréssel keltett levegőplazmával polipropilén felületén, valamint nitrogén plazma-alapú ionimplantációval hálószerkezetű üvegszerű szén felületén, lehetővé téve ezen anyagok újszerű felhasználási lehetőségeit.

XP spektroszkópiával jellemezték a kiindulási és a módosított polikaprolakton fóliák felületi rétegét. Megállapították, hogy a kisnyomású plazmás kezelés hatására a karboxil csoportok részlegesen hidroxil csoportokká alakíthatók, ami növeli a felület nedvesíthetőségét és hatékonyan elősegíti az oszteoblaszt sejtek adhézióját. Ugyanakkor a kezelt filmek továbbra is enzimatikusan lebonthatók maradnak. Hasonló kémiai átalakulásokat figyeltek meg poliuretán aktív-erős plazmás kezelését követően. A megnövekedett nedvesíthetőséget ez esetben is OH csoportok kialakulásához rendelték.

Kemometriai módszerek alkalmazása

Kemometriai módszerek segítségével rangsorolták és csoportosították a policiklusos aromás szénhidrogének Lee-féle retenciós indexeinek előrejelzésére szolgáló modelleket. Osztályozták a hazai ásványvizeket háromféle analitikai módszer adatait használva. A kifejlesztett módszer segítségével ásványvizek hamisítását lehet meggátolni.

Modellezték vízben oldott szerves anyagok szorpcióját különböző hordozókon, meghatározták a tüben történő újfajta extrakciós technika optimális paramétereit, és előrejelezték az átfolyási sebességet és az extrakciót jellemző C-paramétert. A retenciót előrejelezni képes modellek rangsorolása és csoportosítása az EU prioritási listáján szereplő, mérgező, és rákkeltő policiklusos aromás szénhidrogének kromatográfiás elemzését segíti. Az újfajta extrakciós technika gyorsítja és költséghatékonyá teszi a környezetvédelmi fontosságú szerves szennyezők elemzését.

Az ammónium-paravolframát előállítás szilárd-gázfázisú heterogén reakcióval

A kidolgozott eljárással ammónium-paravolframátot (APT), $(\text{NH}_4)_{10}[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{42}] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ -t állítanak elő úgy, hogy volfrámtartalmú port, előnyösen WO_3 -at, NH_3 és H_2O gőzzel érintkeztetnek. Az eljárás szobahőmérsékleten is alkalmazható, és mikrométer alatti szemcseméretű APT-t eredményezhet. A körülmények változtatásával szabályozható a termék kristályvíztartalma.

Nanoméretű szilícium-karbid előállítása termikus plazmában

Nanoméretű szilíciumkarbid rádiófrekvenciás (RF) termikus plazmában történő szintézisét vizsgálták SiO_2 és szén prekursorokból kiindulva. Meghatározták a maximális kihozatalhoz tartozó optimális működési paramétereket, valamint eljárást dolgoztak ki a kapott szilícium-karbid tisztítására. Laboratóriumi vizsgálataikra alapozva gyártási technológiát dolgoztak ki, és külföldi partnerekkel együtt egy komplex félüzemi gyártóegységet terveztek és építettek meg Olaszországban. A gyártási technológia előnye, hogy egy, az autógumik pirolízisekor keletkezett melléktermék (korom) újrahasznosítását teszi lehetővé. Vizsgálták az eljárás során kapott SiC por szinterelését tömbi termék előállításához. Megállapították, hogy olvadákfázisú szintereléssel SiO porból közel 100%-os elméleti sűrűségű kerámia állítható elő. Technológiát dolgoztak ki a szén szennyezőt tartalmazó SiC szinterelésére is.

Mikrokapszulák kialakítása

Eljárást dolgoztak ki olyan nano- és mikrorészecskék előállítására, amelyek vagy maganyagukban hatóanyagot tartalmazó kapszulák, vagy szilárd mátrixban elosztatott hatóanyagot tartalmazó gömbök. Bizonyították, hogy öngyógyító korrózióvédő bevonatokat lehet előállítani antikorróziós anyagot tartalmazó mikrokapszulák felhasználásával. A kapszulákba ezüst nanorészecskéket építve s ezeket bevonóanyagban elosztatva pedig biolerakódást gátló tulajdonságú festékeket kaptak.

A nem toxikus monomerekből felépülő homo- és ko-poli-(β -almasav) és származékainak szintézise lehetővé tette szintetikus oligomerek és polimerek előállítását, amelyekbe az almasavon kívül bizonyos ko-monomereket lehet beépíteni. Ezek természetes körülmények között (vizes oldatban, testszövetben) bekövetkező hidrolízisekor a testbarát almasavon kívül előre meghatározott tulajdonságú (gyulladáscsökkentő, mikroorganizmusok szaporodását gátló) anyagok válnak szabaddá, és fejtik ki hatásukat.

A biológiailag lebomló poli-almasav származékainak gyógyszerhordozóként való alkalmazása egyre növekvő fontosságú. A szintézis körülményeinek változtatásával kívánt tulajdonságú polimereket állítottak elő.

Szuperkondenzátorok fejlesztése

A felületre merőlegesen növesztett 80 µm hosszú szén nanocsövek (CNT) alkotta „sűrű erdő” szintézisét dolgozták ki alumíniumra a Drezdai Fraunhofer Intézettel és Drezdai Műszaki Egyetemmel együttműködésben. Az atmoszférikus nyomású CVD technológián alapuló eljárás folyamatos, szalagszerű, nagy mennyiségű gyártásra is alkalmas. Két különböző katalizátorösszetétel (Fe-Co és Fe-Mo) hatását tesztelték, és megvizsgálták, hogyan befolyásolja a katalizátor összetétele, az alkotók koncentrációja a szén nanocső erdő morfológiáját, sűrűségét, valamint az így előállított elektródok töltéstároló képességét. A CNT elektródokból készített szuperkondenzátorok fajlagos kapacitása, a katalizátor minőségétől függően 25.6 – 61.2 F g⁻¹; a tényleges belső ellenállása 0.42 – 0.15 mΩ g. Az ilyen elektromos tulajdonságú anyagok megfelelnek a nagy teljesítménysűrűségű szuperkondenzátorokban való alkalmazás követelményeinek.

Aranybevonatok készítése térbeli szilícium struktúrákon

Három dimenziós Si(111) és Si(100) struktúrákon galvanikus helyettesítés módszerével arany vékonyréteg bevonatokat alakítottak ki. Eutektikus kötést alkalmaztak a rétegek adhéziójának növelésére. A felületi rétegek orientációjának változását XRD módszerrel vizsgálták. Az eredmények alapján képet kaptak az adhézió erősségét elősegítő jellemzőkről, továbbá a rétegek elektródbevonatként történő alkalmazhatóságáról is. Fotoreziszt technológiával strukturált felületeken is alkalmazták a galvanikus helyettesítéssel történő arany leválasztás módszerét, és meghatározták a fotoreziszt/arany határfelületen kialakuló réteg egyenletlenségeit befolyásoló technológiai paramétereket.

Poliolefinek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása

A kutatócsoport a témát két nagyvállalattal (TVK, Magyarország; Borealis, Austria) együttműködésben folytatta, ami biztosította az eredmények gyakorlati hasznosulását. Új stabilizátor rendszereket fejlesztettek ki, amelyek új multifunkciós stabilizátorok alkalmazásán alapulnak. Kutatást indítottak szabályozott leadású, nanocső hordozóval rendelkező, természetes vegyületekből álló stabilizátor rendszer kifejlesztésére. A Borealis céggel folytatott együttműködésben elveket dolgoztak ki a természetes erősítőszálat tartalmazó többkomponensű polipropilén kompozitok szerkezetének szabályozására, és megállapították a kompozitok szerkezete és tulajdonságai közötti összefüggéseket. Megállapították, hogy az alkalmazott száakkal csak korlátozott ütésállóság érhető el, és irányelveket dolgoztak ki a törési ellenállás növelésére. Az eredmények alapján előkészületben van egy szabadalmi bejelentés összeállítása.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

A természetes erősítőanyagot, töltőanyagot tartalmazó műanyagok kutatása ebben az évben elsősorban a PLA/fa kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusának vizsgálatára irányult. Megállapították, hogy ellentétben az irodalmi állításokkal a PLA és a lignocellulóz erősítőanyagok közötti kölcsönhatás erős. Új kapcsolóanyagok alkalmazásával tovább növelték a határfelületi adhéziót ezekben a kompozitokban. Az erős adhézió miatt a fa törése a kompozitok szilárdságát meghatározó döntő tényező, ezért fenolgyanta impregnálással javították azt. Megállapították, hogy esetenként szerkezeti tényezők is befolyásolhatják a kompozitok szilárdságát. A korábban kidolgozott természetes szállal erősített keményítőtől készült táprudak szabadalmaztatása folyik. Jelentős eredményeket értek el a gyógyászatban alkalmazott poliuretán elasztomerek szerkezetének felderítésében, és funkcionális csomagolóanyagok előállításában is. A kutatások egy jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

Heterogén katalitikus Wacker-eljárás

Kutatásaik a homogén fázisú oxidációs folyamat (közismert nevén Wacker-eljárás) heterogén katalitikus körülmények között történő megvalósítására irányulnak. A projekt célja nagy aktivitás mellett nagy szelektivitással működő, heterogenizált Wacker katalizátor kifejlesztése. Munkájuk célja alkének szelektív katalitikus oxidációjában felhasználható, újfajta katalizátorok előállítása és hatásmechanizmusuk megértése volt. A katalizátorok hordozójaként pillérrel kitámasztott réteges szerkezetű anyagokat (agyagásványokat, réteges kettős hidroxidokat), valamint nanoanyagokat (V_2O_5 nanocsövek, V_2O_5 nanorudak) alkalmaztak. A hordozók felületére rögzítették az oxidációs reakcióban aktív fázist, nevezetesen palládiumot és vanádium-oxidot. Megállapították, hogy a katalizátorokon az alkén oxidáció nagy konverzió mellett magas aldehid, ill. karbonsav szelektivitással játszható le. Katalitikus eljárással csökkenteni lehet fenti termékek előállításakor a káros melléktermékek keletkezését. Katalizátoraikon részletesen vizsgálták az etilén acetaldehiddé alakítását. Azt találták, hogy az acetaldehid termék közel 100%-os szelektivitással képződik, igen magas konverzió mellett. Eredményeik bizonyítják, hogy a Pd/vanádium-oxid redoxi rendszer az alkén-oxigén-víz reaktáns elegyre fejt ki a katalitikus hatást. Rendezett szerkezetű hordozó felületére rögzítve a redoxi rendszert kimagasló katalitikus aktivitás érhető el.

Nanopórusos szilikátok bioaktív molekulák hordozására és kontrollált kibocsátására

A szabályos, rendezett pórusokkal jellemezhető nanopórusos szilikátok, mint például az MCM-41 vagy SBA-15 bioaktív molekulák tárolására és szabályozott kibocsátására alkalmas hordozóanyagok. Az amino-, vagy karboxil csoportokkal felületmódosított szilikátok nagyobb mennyiségű hatóanyag tárolására képesek, mint a módosítatlan pórusos anyagok, és bioaktív hatóanyag kibocsátásuk is lassúbb. Megfelelő organoszilánok és szintézismódszerek kidolgozásával organofil funkciós csoportokat tudtak kapcsolni a hordozó felületén található -SiOH csoportokhoz. Kutatásaik az organofil módosítási eljárások megalapozására és optimalizálására irányultak. Azt találták, hogy a szilícium-dioxid nanorészecskéken kialakított különböző tulajdonságú hidrofil polimer bevonatok kedvezően befolyásolják a hatóanyag kibocsátási jellemzőket. Az elkészült kompozit hordozókat elsősorban gyulladáscsökkentő anyaggal (ibuprofen) vizsgálták, de antibiotikum molekula, mint például a szulfadiazin adszorpcióját is tanulmányozták. Kompozit anyagaik biológiai hasznosíthatóságát citotoxikológiai vizsgálattal is tesztelték, és megállapították, hogy a biológiailag inert szilikátok biokompatibilitása a funkciós csoportok beépítésével nem romlik, továbbá, hogy a polimer bevonatok is kedvező hatásúak. Kutatásaik új típusú nanomedicina termékek kifejlesztését alapozzák meg.

Reakciókinetikai, reakciódinamikai és fotokémiai kutatások

Lézeres reakciókinetikai kísérletekkel meghatározták az OH-gyök és a bioüzemanyagként javasolt γ -valerolakton (GVL) gázfázisú elemi reakciójának sebességi együtthatóját a hőmérséklet függvényében. Eredményeiket elsőként közölték a szakirodalomban. A sebességi együttható nagy érték, ami azt jelzi, hogy GVL reaktivitása hasonló az alifás észterekéhez, és a légkörben gyorsan lebomlik.

Folyadékfázisban végzett fotofizikai kísérleteikben a 9,10-bis-(feniletin)-antracén fluoreszcenciás tulajdonságainak és az oldószer törésmutatójának kapcsolatát tanulmányozták. Eredményeik alapján egyszerű, általános eljárást javasoltak a fluoreszcencia kvantumhatásfok meghatározásánál szükséges törésmutató-korrekciónak elvégzésére. A korrekció fontos például a nagyérzékenységű fluoreszcenciás analitikai eljárásokban.

Három, magas szintű elméleti módszer együttes alkalmazásával vizsgálták a belsőégésű motorok szénhidrogén üzemanyagát modellező metán elektron ütközések által kiváltott

disszociációját. Megállapították, hogy a metán molekula a gyújtást előidéző elektromos kisülésben keletkező nagysebességű elektronokkal ütközve elsősorban a nagyon reaktív CH₃ gyökre és H-atomra bomlik, amelyek képesek az üzemanyag/levegő keverék robbanására vezető láncreakciók elindítására.

Sűrűségfukcionál-elméleti és multikonfigurációs ab initio számítások segítségével feltárták az Fe(II) 'be- és kikapcsolható' ('switchable') tetrazil-, bipyridil- és terpiridil komplexeinek számos, a spin-átmenetet meghatározó tulajdonságát. Az ilyen átmenetifém komplexeket jövőbeli nagy sűrűségű mágneses adathordozó- és más molekuláris eszközök lehetséges anyagaként tartják számon.

Elektrokatalitikusan aktív Pt₃Sn ötvözet fázis kialakítása

A Pt₃Sn fázis köztudottan igen aktív a CO elektrooxidációjában, és katalizálja az etanol elektrooxidációjának kezdeti lépéseit is. Polimer elektrolit membrán (PEM) tüzelőanyag-cellák anód elektrokatalizátorainak fejlesztése során csaknem teljesen tiszta, közel sztöchiometrikus összetételű, elektrokatalitikusan aktív fcc Pt₃Sn ötvözet fázist sikerült kialakítani aktív szén hordozón a Pt felületén adszorbeált hidrogén és Sn(C₂H₅)₄ közötti irányított felületi reakciókkal (CSRs). XRD felvételek bizonyították, hogy a Pt₃Sn ötvözet fázis mennyisége a CSR körülményeinek hangolásával szabályozható. A hidrogénben történő in situ kezelés hatására kizárólag kétfémes Sn-Pt ötvözet fázis alakul ki az XPS eredmények alapján, ami arra utal, hogy a Pt/C katalizátor módosítása Sn(C₂H₅)₄-vel szelektív, azaz nem kerül Sn az aktív szén hordozó felületére. Az így előállított kétfémes katalizátor hatékonyan működött mind a CO, mind a metanol elektrooxidációjában. Ön hozzáadására a CO oxidáció kiindulási potenciálja 500 mV-tal a negatívabb tartományok felé tolódik el, jelezve, hogy az önnel módosított minták CO toleranciája lényegesen jobb, mint a Pt/C katalizátoré. Nyilvánvalóvá vált, hogy a Pt₃Sn (fcc) fázis CO toleranciája és metanol elektrooxidációban mutatott aktivitása meghaladja a PtSn (hcp) fázisét.

Cérium-oxid rétegek növesztése modell felületeken

Cérium-oxid rétegek növekedésének Si(111) hordozón történő vizsgálata során kimutatták, hogy a cérium-oxid szobahőmérsékleten is reakcióba lép a Si(111) 7x7 felülettel, aminek eredményeképpen viszonylag vastag, szilikát jellegű réteg alakul ki a felületen. A rétegben a Ce³⁺ ionállapotok nagyon stabilak, 10⁻⁷ mbar alatti nyomású oxigénben nem oxidálhatók tovább. Az átmeneti rétegre reaktív párologtatással felületi rendezettséget nem mutató cérium-oxid réteg növeszthető, amelyben a domináns ionállapotok vákuumban illetve oxigénben végzett hőkezeléssel Ce³⁺ és Ce⁴⁺ között változathatók. A Si(111) felület és a cérium-oxid réteg között epitaxiális CaF₂ közbülső réteg elhelyezésének segítségével 1x1-es LEED képet mutató, majdnem kizárólag Ce⁴⁺ ionállapotokat tartalmazó cérium-oxid réteg növeszthető. A réteg szabad felületén a rendezetlen rétegnél drasztikusan kisebb mértékben lehet vákuumban végzett hőkezeléssel Ce³⁺ típusú hibahelyeket létrehozni, oxigénben végzett hőkezeléssel pedig eltüntetni.

Vizsgálatok műanyagok pirolitikus újrahasznosítására

Megállapították, hogy a brómozott epoxi égésgátlót, PVC-t és PET-et is tartalmazó hulladékok pirolízisekor a keletkező pirolízisolaj bróm- és klórtartalma jelentősen megnő. A halogéntartalmú komponenseket azonosították. Kimutatták, hogy a nitrogéntartalmú polimerek pirolízistermék összetételét nagymértékben befolyásolja a savas Y zeolitok jelenléte és mennyisége. A poli(N-vinilimidazol) termikus stabilitását és hőbomlását vizsgálva megállapították, hogy a polimer hőbomlása 340–500°C tartományban, egy fő lépésben megy végbe, a hőbomlás két főterméke az 1H-imidazol és az 1-vinilimidazol.

Biomassza anyagok optimális hasznosítását elősegítő kutatások

Gőzrobbantással kezelt fa és lágyszárú növények termoanalitikai vizsgálatával megállapították, hogy a gőzrobbantás hatással van a minták kémiai összetételére és a szerkezetére is. A hemicellulóz- és alkáliion-tartalom csökkenését mutatták ki a kezelt mintákban. A lignin molekulák funkciós csoportjaiban történt változásokat a metoxi-csoportok demetileződésével és az alkil-csoportok lerövidülésével értelmezték. Reakciókinetikai modellezéssel felderítették egy mostanában terjedő biomassza tüzelőanyag, a részlegesen elszenesített fa reaktivitásának függését az előállítás körülményeitől.

Szennyezett talajvizek kármentesítése

A TVK Rt.-vel kötött kutatás-fejlesztési szerződés keretében olajjal (elsősorban poliaromás vegyületekkel) erősen szennyezett felszín alatti vízkészletek in-situ kezelésére, a szennyezés horizontális terjedésének gátlására irányuló kutatásokat végeztek. Az erősen lúgos szennyezett talaj/talajvíz célzott savas kezeléseivel jelentős mértékben sikerült csökkenteni a szennyezés migrációját. A laboratóriumi szintű vizsgálatok eredményei alapján a TVK Rt.-vel folytatandó egyeztetéseket követően várhatóan komplex kutatási terv kidolgozására és elindítására nyílik lehetőség.

b) Tudomány és társadalom

2009 és 2012 között az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése” elnevezésű, Kutatási és Technológiai Innovációs Alap által támogatott konzorciális pályázat (TECH-09-A4-2009-0115 RFRSY09) feladatainak megvalósításában vettek részt. A projekt eredményeiről az Élet és Tudomány folyóirat 2012. július 18-án megjelenő számában (900–901 old.), valamint az INNOTÉKA magazin júniusi számában egy-egy ismeretterjesztő cikk jelent meg a nagyközönség számára, melyek tartalma a következő:

Az Európai Unió irányelve szerint 2015-ig minden tagállamnak gondoskodnia kell a szennyvíz biológiai és fizikai-kémiai tisztításáról. Az intézet karöltve a Budapesti Műszaki Egyetem kutatóival és cégekkel (Uwa Tech Környezet- és Víztechnika Kft., Euro-Open Kft., Multiprojekt Kft., Kémia Technológiai Transzfer Kft.) gazdaságos, környezetbarát, korszerű technológiát fejlesztett ki, amely alkalmas a kis lélekszámú falvak (~2000 fő), tanyák, üdülőkörzetek szennyvizének biológiai tisztítására. Az innovatív megoldások sorát tartalmazó kísérleti szennyvíztisztító telepet a Balaton-felvidéki Rezi községben építették fel.

A konzorcium az úgynevezett merülőtárcsás technológiát fejlesztette tovább. A fejlesztés központi eleme egy csillagkerék, amely 120 darab perforált, adszorbens szemcsékkel megtöltött műanyag csövet tartalmaz. Az aktív biofilmmel bevonódott, forgatott kerék egy harmada folyamatosan a szennyvízben, míg kétharmada a levegőben van, így a biofilm a levegőből az oxigént spontán módon veszi fel kevesebb külső energia igénybevételével, mint ami a hagyományos eleveniszapos bioreaktorok levegőztetéséhez szükséges. A konzorcium a bioreaktoron kívül további részegységeknél (iszapleválasztó, membránszűrő, víz szagtalanító/fertőtlenítő, oxigénes telítő) is új, a jelenlegi eljárásokban használt megoldásoknál hatásosabb és gazdaságosabb módszert alkalmazott. A technológiai sor végén az ivóvízzel összemérhető minőségű tisztított szennyvíz lép ki. A Reziben működő kutató-fejlesztő-oktató-demonstrációs létesítményt 2012 végén le kellett állítani, mert nem sikerült a környék nagy vízközmű szolgáltatásainak támogatását az üzemeltetéshez megszerezni.

Interjú készült a hidrogén-energetikai témakörben az MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Kutatóintézetben folyó tüzelőanyag-cellákkal kapcsolatos kutatásokról. Az interjú a Magyar Hidrogén és Tüzelőanyag-cella Egyesület 2012 őszi hírlevelében jelent meg.

A BME nyílt napján demonstrációval és laborlátogatással népszerűsítették a polimer kémiát és fizikát a BSc, illetve MSc képzésre jelentkező tanulók és hallgatók számára.

A Tinnyei Általános Iskola és a budapesti Berzsenyi Gimnázium diákjai bemutatóval egybekötött laborlátogatásokon vettek részt az intézetben.

Az MTA Magyar Tudomány Ünnepe Tárt Kapuk rendezvényeinek sorában négy ismeretterjesztő előadást tartottak a felületkémia, a hőmérsékletmérés, a szuperkapacitások és az archeometria témákban.

A kémia és a régészet kapcsolata témában több szóbeli és írásbeli ismeretterjesztés történt: a Magyar Tudomány Ünnepe 2012 alkalmából hangzott el egy előadás, a Magyar Kémikusok Lapjában jelent meg egy dolgozat és a Delta című tudományos ismeretterjesztő TV sorozatban a Habán kerámiák archeometriai kutatását mutatták be.

Az intézet negyedik alkalommal szervezte meg az „AKI Kíváncsi Kémikus” nyári kutatótábort. Az egyhetes kutatótáborban 24, a kémia iránt érdeklődő, tehetséges középiskolás diák 10 témában folyó kutatásba kapcsolódhatott be.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet hazai kapcsolatrendszerében az egyetemek töltnek be nagyon fontos szerepet. A közös kutatások szervezeti kereteit három egyetem esetében közös laboratóriumok adják: 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 közös professzori laboratóriumot működtetnek, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézetével pedig a 2010-ben új közös laboratórium, a Környezeti Kémiai-fizikai Laboratórium kezdte meg munkáját.

A Pannon Egyetemmel funkcionális nanorészecskék témában dolgoznak együtt. Porfirinkomplexek szerkezetét és fotofizikáját vizsgálták. Az intézetben végzett kvantumkémiai számítások segítségével értelmezték az egyetemen előállított vízoldható porfirin-fémion komplexek tulajdonságait. Gázolajok aromástartalmának csökkentése és/vagy folyási tulajdonságainak javítása katalitikus úton témában szénhidrogének izomerizálására alkalmas Pt-tartalmú bifunkciós katalizátorokat szintetizáltak.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki Karával műanyagok szerkezet – tulajdonság összefüggéseit kutatják. A BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékkel közös OTKA projekt keretében olyan ismeretekhez jutottak, amelyek hozzájárulnak a cellulóz alapú bioetanol gyártás hatékonyabbá tételéhez. A BME Gépészmérnöki Kar, Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékkel energetikai célokra alkalmazható biomassza anyagok hőbomlási és égési tulajdonságait határozták meg.

Az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel léggörkémiai és fotokémiai kutatásokat folytatnak. Nem formális együttműködésben a Semmelweis Egyetemmel elsősorban a gyógynövényekkel és azok fémiontartalmával kapcsolatban végeztek analitikai vizsgálatokat, az Óbudai Egyetemmel nanorétegek és nanokapszulák kialakításával kapcsolatos témákkal foglalkoznak.

Az intézet munkatársai magas óraszámokban oktattak egyetemeken. Graduális és posztgraduális előadásokat tartottak, szemináriumokat és laborgyakorlatokat vezettek a BME Vegyész- és Biomérnöki Karán, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán, a Pannon Egyetemen, a Semmelweis Egyetem és az Óbudai Egyetemen. Az ELTE, a BME, a

Pannon Egyetem és az Óbudai Egyetem hallgatóinak TDK, BSc, MSc és PhD munkáit irányították, nyári szakmai gyakorlatra fogadták őket.

Az egyetemek mellett ugyancsak fontosak a kapcsolatok az MTA kutatóhálózatán belüli intézetekkel, különösen a Természettudományi Kutatóközpont Molekuláris Farmakológiai Intézetével, a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézettel és a Szerves Kémiai Intézettel. A kutatásokat az intézeti források mellett közösen elnyert OTKA pályázatokból fedezik, az eredmények jelentős számú publikációban mutatkoznak meg. Az MTA TTK-n kívül a Wigner Fizikai Kutatóközponttal a Fe(II) komplexek spin-állapotai közti átmeneteket kutatják.

Az utóbbi években megélénkültek a kapcsolatok a múzeumokkal is. Különböző muzeális értékű fémtárgyak és kerámiák összetételét határozták meg archeometriai kutatások céljából a Pest Megyei Múzeumok Igazgatósága, a Szépművészeti Múzeum és a Magyar Nemzeti Múzeum megbízásából.

Az intézet kutatói nagy számban vesznek részt az MTA bizottságainak és munka-bizottságainak és más tudományos testületek, valamint folyóiratok szerkesztőbizottságainak munkájában.

Mintegy húsz magyarországi és néhány külföldi kis- és középvállalat megbízásából az intézet kutatási és fejlesztési feladatokat, méréseket végzett. Többen közülük igénybe vették az intézet akkreditált laboratóriumának szolgáltatásait. Kilenc nagyvállalattal – melyek közül négy külföldi, illetve multinacionális – áll kapcsolatban az intézet. A tőlük kapott feladatok jellemzően nagyobb volumenűek és gyakran tudományos igényűek. Az eredmények az anyagi bevétel mellett esetenként közös publikációkban vagy szabadalmakban mérhetők.

Nemzetközi kapcsolatok

A „Hibrid nanorendszerek inverz gázkromatográfiás és kemometriai jellemzése” című témát kétoldalú akadémiai egyezmény keretében művelték a Poznani Műszaki Egyetem (Lengyelország) kutatóival közösen. A munka, amely az elmúlt években 7 közös publikációt eredményezett a gázkromatográfiás töltőanyagok csoportosítására és hasonlóságaik kimutatására irányult, és újfajta extrakciós eljárás kifejlesztéséhez vezetett. Különböző kemometriai és analitikai módszerek összehasonlítását az Újvidéki Műszaki Egyetemmel végezték. A kapcsolattartást TÉT együttműködés biztosította.

A kolozsvári Babeş-Bolyai Tudományegyetemmel az „Erdélyi borok származásának vizsgálata nyomelem-összetétel alapján” és a „Természetes savas források összetett kémiai és algológiai vizsgálata” témában dolgoztak együtt.

Biobutanol extraktív fermentációjában egy kombinált módszert hoztak létre a kínai New Energy Co. baktériumtörzseivel és az intézetben kidolgozott szeparációs technológiával. Az indiai Jodhpur Egyetem kutatóival kétoldalú akadémiai egyezmény keretében permanganát és kromát vegyületek és szerves anyagok reakcióinak kinetikáját jellemezték, továbbá részt vettek indiai PhD-hallgatók oktatásában is.

Szuperkondenzátorok fejlesztése a célja egy újonnan indult FP7 projektnek. Ennek keretében egy korábbi sikeres Európai Unió által finanszírozott témát folytatnak a drezdai Fraunhofer Institute for Material and Beam Technology és a Drezdai Műszaki Egyetem kutatóival közösen.

Több éve eredményesen dolgoznak együtt az Ulmi Egyetemmel. Különböző fém/folyadék modell rendszereken tanulmányozták, hogy az elektrokémiai kettősréteg átrendeződése milyen időfüggést mutat. Kombinált működésű atomerő-mikroszkópia módszerének kialakítása, ill. tökéletesítése céljából nagy áramérzékenységű bipotenciosztátot fejlesztenek ki a Berni Egyetem munkatársaival együttműködve.

A „Légkörkémia és éghajlatváltozás: halogén- és oxigéntartalmú szerves molekulák reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálata” című témában elnyert Magyar–görög TÉT pályázatkeretében 2013-ban kezdik meg munkájukat.

Molekulák elektron-ütközés hatására történő disszociációjának elméleti vizsgálata témában több évtizede működnek együtt az USA-beli Northwestern University kutatóival. Megállapították, hogy a belső égésű motorokban a gyújtószikra hatására milyen arányban képződnek a különböző reaktivitású gyökök.

A Bécsi Egyetemmel közösen végzett számítások biztosították az elméleti hátteret a Stony Brook University-n (New York, USA) végzett ún. „photon locking” eljárás első kísérleti megvalósításához vibrációs hullámfüggvények esetén. Ugyancsak molekuladinamika számításokat végeztek a Bécsi Egyetem mellett a Dán Műszaki Egyetem kutatóival közösen. Fe(II) komplexek spin-állapotai közti átmeneteket vizsgáltak elektron-szerkezeti számításokkal. A munkában hazai kutatók mellett részt vettek a spanyolországi Universitat Rovira i Virgili munkatársai is.

A műanyagok kutatása területén több nemzetközi projektben vettek részt. Gyógyászatban használt polimerek szerkezet-tulajdonság összefüggéseivel foglalkoztak egy TÉT megállapodás keretein belül. (Az együttműködő partner a University of Twente volt.) Az Európai Unió által finanszírozott témában PP és PLA/fa kompozitokat állítottak elő és jellemezték a Pisai Egyetem és további 14 európai intézmény kutatóival közösen. Újgenerációs PP/fa kompozitok fejlesztésére, az ütésállóság növelésére kaptak megbízást a Borealis GmbH-től. PA6/montmorillonite nanokompozitok deformációs mechanizmusát kutatják a Liège-i Egyetemmel együttműködésben.

Szintetikus polimerek és biomassza anyagok hőbomlását tanulmányozzák adalékanyagok és katalizátorok jelenlétében. Kimutatták, hogy milyen veszélyes anyagok keletkeznek brómtartalmú égésgátlót és klórt tartalmazó polimerekből. A munkát az Indian Institute of Petroleummal közösen végzik.

Több mint tíz éve tartó közös munkában biomassza anyagokat vizsgálnak a Norwegian University of Science and Technology munkatársaival. A biomassza anyagok faszénként történő hasznosításával a University of Hawaii-val dolgoznak együtt.

Az intézet egyik fiatal kutatója utóégető katalizátorok fejlesztésén dolgozik Franciaországban a caeni egyetemen (Université de Caen). A kifejlesztett katalizátorok aktivitását szénhidrogén oxidációs reakcióban tanulmányozzák.

Mo-V alapú vegyesoxid katalizátorokat terveztek és állítottak elő a Clariant Produkte GmbH-val kötött kutatási szerződés keretében. A két szabadalmat eredményező kutatásban akrolein szelektív oxidációjában közel 95 % hozammal sikerült akrilsavat előállítani. A novoszibirszki Katalízis Intézet munkatársaival magyar–oroszl kétoldalú akadémiai egyezményben hordozón rögzített heteropolisav katalitikus aktivitását módosították, és alkalmazhatóvá tették szerves szintézisekhez.

Magyar–spanyol kétoldalú akadémiai egyezmény biztosította a kapcsolattartás költségeit a direkt metanol tüzelőanyag cellák elektro-katalizátorainak fejlesztéséhez. Az Instituto de Catálisis y Petroleoquímica kutatóival olyan fcc Pt₃Sn ötvözet fázist sikerült kialakítani, amely aktívnak bizonyult CO és metanol elektrooxidációjában. Egy korábbi TÉT egyezmény során megkezdett munka folytatásaként a Santa Fe Egyetem Vegyészmérnöki Karával közösen előállított Sn-Pt/Al₂O₃ katalizátorokkal kapcsolatban azt találták, hogy a Sn-Pt ötvözet Lewis- sav típusú SnO_x oxidok jelenlétében kedvező katalitikus viselkedést mutat az n-bután dehidrogénezésében.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

A „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére” című OTKA PD-pályázat keretében fehérjebontó enzim specifikus aktivitásának vizsgálatában alkalmazható, spektrofotometriás enzimaktivitás mérések alapjául szolgáló kromofór funkciós csoporttal ellátott peptid szubsztrát analógok arany felületen történő rögzítésére végeztek kísérleteket. Spektrofotometriai és elektroanalitikai detektációban is alkalmazható funkciós csoportok esetében lehetőség van az oldatfázisban lévő, illetve a rögzített peptidok hasítása nyomán érzékelhető, az enzimaktivitás mértékére jellemző abszorbancia és elektrokémiai jelek összehasonlító mérésére. A pályázat teljes támogatási összege 11 M Ft, ebből a 2012-ben felhasználható rész 4 M Ft volt.

Az „Olefinok szelektív katalitikus oxidációja Pd/vanádium-oxid katalizátorokon” című OTKA pályázat első évében a résztvevők kiépítették a Wacker katalizátorok aktivitásának mérésére szolgáló katalitikus rendszert, valamint kidolgozták a reakciótermékek azonosítására szolgáló analitikai módszereket. Három csoportba sorolható katalizátorsorozatot szintetizáltak: oxidhordozós katalizátorok, réteges szerkezetű katalizátorok, V_2O_5 nanocső alapú katalizátorok. Jellemezték a katalizátorokat, és vizsgálták katalitikus aktivitásukat az etilén parciális oxidációjában, víz jelenlétében. Eredményeiket egy előadásban és két poszterben ismertették. Az eddigi munkákból egy közlemény jelent meg, kettő előkészítés alatt áll. A pályázati támogatás mértéke: 29 M Ft, a 2012-ben felhasznált összeg: 11 M Ft.

A „Sokkomponensű modellkatalizátorok megújuló forrásból történő energiatermelésre: fém és fém-oxid nanoszerkezetek szinergikus hatása alkoholok átalakulásaiban” című OTKA pályázatban modellkatalizátorok készítése céljából cérium-oxid epitaxiális növesztésének lehetőségeit vizsgálták Si(111) hordozón. A szilícium és a cérium-oxid közti reakció miatt az epitaxiális rétegnövesztés feltétele egy vékony, epitaxiális CaF_2 közbülső réteg kialakítása. Meghatározták az epitaxiális, illetve a rendezetlen cérium-oxid redukciós-oxidációs sajátosságait. Megkezdődött a nikkell nanoszerkezetek kialakítása és jellemzése a cérium-oxid felületeken. Egy másik kísérletsorozatban Ti-W vegyesoxid fázis előállítása történt. A tapasztalatok alapján a TiO_2 és a rajta kialakított wolfram-oxid szilárdfázisú reakciója modellrendszerek kialakítására is alkalmas lehet. A pályázati támogatás mértéke: 17 M Ft, ebből 2012-ben 5 M Ft-ot használtak fel.

A „Magas hőmérsékletű radarelnyelő rétegek kutatása” című 2012-ben elnyert NFÜ-pályázat kidolgozása a szerződéskötést követően 2013-ban kezdődik meg, a K+F munka eredményei ezt követően jelentkeznek majd. A pályázat teljes támogatási összege 120 M Ft.

Nemzetközi pályázatok

A 2012-ben elnyert és 2013-ban induló, az Európai Unió által finanszírozott pályázat megnevezése: „FP7 Large-scale integrating project” PLIANT (Process Line Implementation for Applied Surface Nanotechnologies) című projekt célja folyamatos, nagy áteresztőképességű gyártástechnológiák kidolgozása előírt tulajdonságú nanoszerkezetek előállítására, elsősorban atmoszférikus nyomású plazma-CVD és atomi rétegleválasztás (ALD) felhasználásával. Az előállítandó termékek közül az intézet a nagy energiasűrűségű és nagykapacitású elemek és hibridkondenzátorok vizsgálatát végzi. A pályázatból a magyar félnek összesen 97000 EUR támogatás jut.

A „NANOINDENT-plus EU-FP7 THEME” megnevezésű pályázat témája nanokarcolás mérés. 2012-ben egy, már meglévő nanoindenter berendezést javítottak, és a megjavított készüléket beüzemelték. A munkát az Európai Unió 66750 EUR-val támogatta.

Az Európai Unió által finanszírozott „Magyarország-Szlovákia Határon Átnyúló Együttműködési Program 2007-2013” keretében kémiai eljárásokat dolgoznak ki a szlovák-magyar határmenti régióban keletkező élelmiszerként nem hasznosítható biomassza értékes anyaggá alakítására. A pályázat vezető partnerével a Szlovák Műszaki Egyetemmel együttműködve megkezdték a tervezett közös kutató laboratórium kialakítását, valamint egy nagynyomású átáramlásos mikroreaktor megépítését. Katalitikus vizsgálatokat végeztek szerves sav modellvegyületekkel. A növényi hulladékok feldolgozásakor keletkező savak oxigén heteroatom tartalmának katalitikus csökkentését (HDO) oktánsav katalitikus hidrogénezésével modellezték. Kidolgozták az oktánsavból képződő lehetséges termékelegy összetételének meghatározására szolgáló gázkromatográfiai módszert. Kétfémes (Cu vagy Ni és In) oxidhordozós katalizátorokat készítettek, és meglévő reaktor rendszerünk alkalmazásával katalitikus vizsgálatokat végeztek. Továbbá nitrogén heteroatomot tartalmazó szerves modellvegyületek, mint pl. propil-amin katalitikus hidrodenitrogénezését (HDN) is tanulmányozták. Kidolgozták a lehetséges termékelegy összetételének meghatározására szolgáló gázkromatográfiai módszert. Oxidhordozós Ni katalizátorokat készítettek és meglévő reaktor rendszerük alkalmazásával katalitikus vizsgálatokat végeztek. A pályázati támogatás mértéke: 381647 EUR, ebből 2012-re jutó összeg: 64045 EUR.

Ugyancsak a „Magyarország-Szlovákia Határon Átnyúló Együttműködési Program 2007-2013” fedezi a „Tejipari termékek újszerű minőségi vizsgálata – modern bioanalitikai eszközök használata” témájú pályázat költségeit. A pályázat első évében az intézet a tudományos irodalomból már ismert spektrofotometriás módszereket honosított meg és alkalmazott a vizsgált fehérjebontó enzimrendszer vizsgálatára. A kutatómunka során molekuláris biológiai és nanotechnológiai kutatások eredményeinek felhasználásával olyan szenzorfelületeket alakítottak ki, amelyek fehérjebontó enzimek mennyiségi jellemzésére alkalmasak. A magyar fél munkáját 202880 EUR-val támogatják, ebből 2012-re 51505 EUR jutott.

Az „International Visegrad Fund Grant for Mihail Trunov” megnevezésű pályázat témája optikai mikromegmunkálási módszer kifejlesztése. A pályázat keretében kakogenid bevonatokat készítettek és vizsgáltak. A pályázati támogatás mértéke: 3000 EUR.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Héberger K, Škrbić B: Ranking and similarity for QSRR models in predicting Lee retention indices of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Analytica Chimica Acta*, 716: 92-100 (2012)
2. Veres M, Tóth A, Mohai M, Bertóti I, Szépvölgyi J, Tóth S, Himics L, Koós M: Two-wavelength Raman spectroscopy of poly(ethylene terephthalate) surfaces modified by helium plasma-based ion implantation. *Appl. Surf. Sci.*, 263: 423-429 (2012)
3. Dörfler S, Felhösi I, Kék I, Marek T, Althues H, Kaskel S, Nyikos L: Tailoring structural and electrochemical properties of vertical aligned carbon nanotubes on metal foil using scalable wet-chemical catalyst deposition. *J. Power Sources*, 208: 426-433 (2012)
4. Pajkossy T: Impedance spectra of Pt(100) in aqueous H₂SO₄ and HCl solutions around the hydrogen adsorption-desorption peak, *Z. Phys. Chem.*, 226(9-10): 935-943 (2012)
5. Keledí G, Hári J, Pukánszky B: Polymer nanocomposites: structure, interaction, and functionality. *Nanoscale*, 4(6): 1919-1938 (2012)
6. Bagdi K, Molnár K, Kállay M, Schön P, Vancsó JG, Pukánszky B: Quantitative estimation of the strength of specific interactions in polyurethane elastomers, and their effect on structure and properties. *Eur. Polym. J.*, 48(11): 1854-1865 (2012)

7. Decolatti H, Solt H, Lónyi E, Valyon J, Miró E, Gutierrez L: The role of Pd-In interactions on the performance of PdIn-Hmordenite in the SCR of NO_x with CH₄, *Catalysis Today*, 172(124): 131 (2012)
8. Herranz T, García S, Martínez-Huerta MV, Peña MA, Fierro JLG, Somodi F, Borbáth I, Majrik K, Tompos A, Rojas S: Electrooxidation of CO and methanol on well-characterized carbon supported Pt_xSn electrodes. Effect of Crystal Structure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(8): 7109-7118 (2012)
9. Czégény Zs, Jakab E, Blázsó M, Bhaskar T, Sakata Y: Thermal decomposition of polymer mixtures of PVC, PET and ABS containing brominated flame retardant: Formation of chlorinated and brominated organic compounds. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 96: 69-77 (2012)
10. Kótai L, Bálint Sz, Gács I, Lakatos Gy, Angyal A, Mehrotra RN: A simple method for calculation of the composition of Type I clathrate hydrates. *Z. Anorg. Allgem. Chem.*, 638: 648-651 (2012)

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ENZIMOLÓGIAI INTÉZET

1113 Budapest, Karolina út 29.

telefon: (1) 279 3115; fax: (1) 466 5465

e-mail: buday.laszlo@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az Enzimológiai Intézetben számos tudományterületet átfogó, interdiszciplináris kutatások folynak, melyek során mind a biológia, mind a fizika és kémia tudománya által kínált lehetőségek alkalmazásra kerülnek. A kutatóhelyen részben szerkezeti biológiai alapkutatások folynak, melyek lehetővé teszik a fizioiogiás és patofizioiogiás folyamatok sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezet biológia mellett folyamatosan bővül a kutatási tevékenység a komplex biológiai folyamatok megértését célzó rendszerbiológia irányába a proteomika és bioinformatika lehetőségeinek kihasználásával. Így többek között vizsgálja a sejtekben zajló jelátviteli utakat, a rendezetlen fehérjék működését, a komplementrendszer aktiválódási mechanizmusait molekulaszerekezeti alapon, a daganatos és neurodegeneratív betegségek kialakulásához vezető egyes folyamatok, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. Munkatársaik négy egyetemen tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben mind posztgraduális oktatásban. Intézetük ezzel egy időben közel harminc PhD-hallgató oktatását is ellátja, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

Az intézet alapkutatási eredményeinek hasznosítására együttműködések jöttek és jönnek létre különböző kis- és nagyvállalatokkal. 2012-ben az intézet aktív módon közreműködött a Richter Gedeon Nyrt. és MEDA terápiás szerek fejlesztési projektjeiben, valamint együttműködött a Combit Számítástechnikai Kft.-vel, az Albacomp Számítástechnikai Zrt.-vel és a Valdeal Innovációs Zrt.-vel is a FIXPRED9 pályázat keretében. Fontos feladatuknak tekintik a magyar tudomány eredményeinek nemzetközi szinten történő képviselését, amit nemzetközi pályázatok résztvevőiként és nemzetközi szervezetekben viselt tisztségek útján valósítanak meg.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A *Jelátviteli Munkacsoport* 2012-ben tovább folytatta a megkezdett sikeres kísérleteket. A munkacsoport alapvetően két ún. állványfehérjét vizsgál, ezek a Caskin és a Tks fehérjecsaldók. 2012-ben publikálták, hogy a Tks4 (HOFI) fehérje szerepet játszik az EGF jelátvitelében, részt vesz a sejtmozgás és a sejtek kiterülése szabályozásában. A Tks5 (FISH) fehérjéről elsőként mutatták ki, hogy szintén részt vesz az EGF jelpályában, ugyanis a sejtek stimulálását követően tirozin oldalláncokon foszforilálódik. Ráadásul EGF hatására a fehérje a sejtmembránhoz transzlokálódik, melyben pleckstrin homológ (PH) doménje játszik fontos szerepet. Végül sikerült publikálniuk azt az eredményüket, melyben kimutatták az EphB1 receptor tirozin kináz/Nck/Caskin1 komplex létezését, illetve azonosították a Caskin1 EphB1 kináz-függő foszforilációs helyeit. Elsőként mutatták ki továbbá, hogy egy SH3 domén tirozinton történő foszforilációja megváltoztatja a domén szerkezetét.

A munkacsoport elsősorban felfedező kutatásokat végez, így 2012-ben nem jelentettek be szabadalmat.

A *Sejt Architektúra munkacsoport* jelen kutatási eredményei bizonyították, hogy a TPPP/p25 aktív részese különböző CNS betegségek kialakulásának, mint pl. a Parkinson-kór és más szinukleinopátiák vagy a szklerózis multiplex. A TPPP/p25-tel kapcsolatos eredmények magas impaktfaktorú nemzetközi folyóiratokban kerültek publikálásra, következésképpen a TPPP/p25 úgyis, mint potenciális biomarker, a tudományos közösség érdeklődésének fókuszába került, mint azt számos visszajelzés bizonyította/bizonyítja, pl. felkérés meghívott előadónak nemzetközi konferenciákra vagy tudományos összefoglalók/könyvfejezetek megírására. Ilyen kiemelkedő esemény volt a Japán Neurológiai Társaság elnökének meghívása és vendéglátása 2012 májusában, Tokióban. Az éves nemzeti neurológiai konferencián a 6000 japán kutató mellett mindösszesen 10 európai és amerikai előadó kapott meghívást. Valójában a Tokiói Egyetem neurológusai TPPP/p25-tel kapcsolatos klinikai kutatásokat indítottak el; a konferencia megfelelő alkalmat teremtett tudományos kapcsolat kialakítására. Megemlítendő a frankfurti egyetem egyik professzora és a Szegedi Tudományegyetem neurológus professzorainak érdeklődése, akik konkrét tudományos együttműködési javaslattal keresték meg a munkacsoportot, és PD valamint HD transzgenikus állatok agymintáit, illetve szklerózis multiplexes betegek liquor mintáit küldték el a TPPP/p25-tel kapcsolatos vizsgálatokhoz. Ezeken túlmenően, két gyógyszergyár (MEDA és Richter Gedeon Nyrt.) fejezte ki érdeklődését a csoport kutatásai iránt és támogatta/támogatja azokat (ld. pályázatok/megbízások).

A FixPred projekt keretében létrehozták a génpredikciós hibák azonosítására és javítására alkalmas MisPred és FixPred honlapokat. A MisPred tizenegy biológiai dogmán alapuló módszer a génpredikciós módszerekkel rosszul megjósolt gének automatikus azonosítására. A MisPred eszközök és a MisPred adatbázis akadémiai kutatók számára hozzáférhető a <http://www.mispred.com/> webhelyen. Kifejlesztették a FixPred pipeline-t a tizenegy konfliktus alapján hibásként azonosított szekvenciák kijavítása érdekében. A tesztelést követően a Fixpred eszközöket és adatbázist is hozzáférhetővé teszik akadémiai kutatók számára.

Mutagenesis vizsgálatokkal lokalizálták a WIF-1 fehérje Wnt kötőhelyét. Az a megfigyelésük, hogy egyes mutáns fehérjékben a mutáció a fehérje Wnt5a kötését erősítette, míg Wnt3a kötését gyengítette arra utal, hogy ezek az aminosav oldalláncok alkotják a WIF-1 Wnt-specifitását meghatározó fehérje felszínt.

Eljárást dolgoztak ki az izomnövekedést befolyásoló miosztatin növekedési faktor prekursorának, a nagyméretű promiosztatin fehérjének bakteriális expresszióval történő előállítására. A módszert leíró szabadalmi eljárást elindították.

A *Membránfehérje Bioinformatika Munkacsoport* a rangos, 8-as impaktfaktorú *Nucleic Acids Research folyóiratban* közölte a transzmembrán fehérjék szerkezetét összegyűjtő adatbázis (PDBTM) új, korszerűsített verzióját.

A *Fehérjeszerkezet Munkacsoport* az oldott anyagokat körülvevő vízburok kvantum kémiai leírását adta meg. Két nyilvános szervert készítettek, és elérhetővé tettek a világhálón. Az egyik fehérje szerkezetekben található kölcsönhatások megjelenítésére és elemzésére szolgál. A másik egy korszerűsített transzmembrán fehérje adatbázis kereső motorokkal. A fehérjék rendezetlen szakaszai és a rákos megbetegedésekkel kapcsolatos mutációk közötti kapcsolatokat tártak fel.

A *Genom Stabilitás Kutatócsoport* egyik fő 2012-es eredménye az ultraibolya sugárzás hatásainak vizsgálata területén született. Az ultraibolya fény által okozott tipikus DNS-károsodások közül leggyakoribb lézió a ciklobutil pirimidin dimer, melynek szintetikus formájához egy Osaka University-n dolgozó vegyészekkel folytatott kollaboráció keretében

jut hozzá a kutatócsoport. A léziót tartalmazó DNS-molekulákat élő sejtekbe bejuttatva lehetségessé vált a sérült DNS-szakasz replikációs mechanizmusának feltérképezése, valamint a folyamat által okozott tipikus mutációs spektrum meghatározása. Az eredmények segítik a bőrdaganatok kialakulásának megértését, és magyarázatot kínálnak a malignáns melanómát okozó leggyakoribb genetikai mutáció keletkezésére. Mivel a bőrben alakulnak ki leggyakrabban daganatos elváltozások, és ezek nagyrészt elkerülhetőek az ultraibolya sugárzás elleni védekezéssel, az eredményeknek egyértelmű a társadalmi relevanciája. A kutatás ezen szakaszának eredményei 2012-ben közleményben is megjelentek.

A kutatócsoport emellett hozzájárult egy, a kutatóközponton belüli kollaborációban folyó munkához, mely megmutatta, hogy a genomiális DNS-metiláció nem osztódó sejtekben is reverzibilis. Ez új perspektívákat nyit meg a génexpresszió szabályozásának kutatásában. Az eredmények szintén közlésre kerültek 2012-ben.

2012 januárjában elindult a *Membránfehérje Munkacsoport* az ERC Starting Grant pályázata. A Lendület-pályázatban megfogalmazott célokkal összhangban egy ATTUNE áramlási citométer került beszerzésre. A készülék jelenleg az egyetlen olyan kétlézeres áramlási citométer, amely 405 nm-es lézerrel is rendelkezik. Hasonló paraméterekkel rendelkező készülék az Enzimológiai Intézetben, vagy akár a Természettudományi Kutatóközpontban nem volt; szabad kapacitását más csoportok is kihasználhatják. Megállapították, hogy az ABCB6 fehérje az endolizozómális rendszerben található. Megállapították, hogy az ABCG2 megjelenése a vörösvérsejtek membránjában korrelál farmakológiailag releváns polimorfizmusokkal.

Az *Aktív Transzportfehérjék Munkacsoport* 2012-ben elért eredményei – azok alapkutatási természetének megfelelően – elsősorban nemzetközi „peer-reviewed” folyóiratokban megjelent, illetve elfogadott cikkekben manifesztálódtak. Felfedezték az ABCC6 gén expressziós szabályozásának egyik fontos elemét. Kísérleteikkel megerősítették, hogy az ABCC6 fehérje a plazmamembránban lokalizálódik, ezzel megcáfolva a lehetséges mitokondriumhoz való kötődést. Két review megírására kérték fel őket, melyekben leírták az ABCC6 szerepét az érfalak kalcifikációjában. Egy kollaborációs munka keretében új szignalizációs útvonalat írtak le, amely az ABCG2 gén expresszióját szabályozza HepG2 sejtekben. Részt vettek az ABCG2 transzporter és számos farmakológiailag fontos molekula kölcsönhatásának tanulmányozásában és leírásában. Részt vettek továbbá a különböző lipid-környezetben rekonstituált tisztított transzporter karakterizálásában.

A *Rendezetlen Fehérje Munkacsoport* számos eredményt ért el a 2012. évben.

Rendezetlen fehérjék komplexeinek szerkezeti jellemzése: A kutatócsoport a thymosin $\beta 4$ (TB4) fehérje különböző partnerekkel alkotott komplexeinek jellemzését végezte el, melynek során egy újonnan felfedezett biokémiai jelenség, a „bolyhos” komplexek kialakulásának és működésének jellegzetességeit sikerült jobban megérteni. A kutatócsoport eredményei hozzájárulnak ahhoz, hogy jobban meg lehessen érteni a TB4 szerteágazó hatásainak a biokémiai hátterét, mely magában hordozza az orvostudományi, gyógyszerkutatási felhasználás lehetőségét, emellett fontos alapkutatási jelentősége is van.

Rendezetlen fehérje-chaperonok működésének *in vivo* vizsgálata: 2012 folyamán a csoport munkatársai kidolgoztak egy módszert, melynek segítségével a rendezetlen növényi chaperon ERD14 stresszvédő funkcióját élő baktériumsejtekben lehet vizsgálni. A vad típusú ERD14 kifejeztetése kedvezően hat a baktériumsejtek túlélésére, és a különböző mutáns ERD14 fehérjék hatása különbözik a vad típusától. Ezek az eredmények a gyógyszerkutatás szempontjából is érdekesek, mert az ilyen, rendezetlen chaperonok alkalmasak lehetnek arra, hogy különböző, fehérje alapú készítmények eltarthatóságát, stabilitását megnöveljék.

Deinococcus radiodurans Nudix fehérjéjének vizsgálata: A *Deinococcus radiodurans* (Dr) egy extrém stressztűrő baktérium, mely rendkívüli kiszáradást és magas sugárzást is képes

elviselni. A kutatócsoport egy olyan Dr Nudix fehérjével foglalkozik, mely rendelkezik egy hosszú N-terminális rendezetlen régióval. A hipotézis szerint ez a régió szerepet játszik a fehérje ellenálló képességének megőrzésében stresszkörülmények között is. Sikertült kimutatni, hogy a vad típusú és a rendezetlen régióval nem rendelkező mutáns aktivitása egymással összevethető, de stressztűrő képességükben jelentős különbségek mutatkoznak. Két másik mutáns Nudix DNS-konstrukciója is elkészült, melyeknek a kifejeztetésére és jellemzésére a következő évben kerül majd sor.

Rendezetlen fehérjék *in vivo* életidejének meghatározása: A rendezetlen fehérjék sejten belüli élettartamának meghatározása érdekében az ERD14 és a globuláris GST-fehérjét három, különböző mennyiségű proteázzal rendelkező *E. coli* törzsbe transzformálták. Eredményeik alapján a rendezetlen és a globuláris fehérje sejten belüli élettartama nem különbözik egymástól. Ezek a kutatások választ adhatnak arra az egyik legfontosabb alapkérdésre, hogy a rendezetlen fehérjék sejten belül is rendezetlenek-e, és ilyen formában is képesek-e fennmaradni a citoplazmában.

Bioinformatikai kutatások: 2012-ben a korábban megkezdett munkák befejezése, publikálása történt meg. Jelenleg a fő kutatási terület a rendezetlen fehérje szakaszokon kialakuló rövid fehérje kötő motívumok kutatása. Ezek a fehérjeszakaszok felelősek a legtöbb rendezetlen fehérje/fehérje szakasz funkciójáért, ezért megismerésük fontos része a rendezetlenség kutatásnak. Eredményeik hozzájárulnak a rendezetlen fehérjék evolúciójának jobb megértéséhez, másrészt a kölcsönhatások feltérképezése komoly orvosi biológiai jelentőséggel bírhat. Különböző együttműködések keretében készítették egy nagy mennyiségű adatot tároló szervert és programot, valamint különböző genetikai betegségek hátterében bioinformatikai módszerekkel keresték a betegséggel összefüggésbe hozható miRNS-eket, és a bennük található eltéréseket (főleg SNP-eket). Ezen kívül a prion fehérjéhez hasonló rendezetlen Shadoo fehérje szerkezeti és evolúciós elemzését végezték.

A *Szerkezeti Biofizika Munkacsoport* tisztázta a komplementrendszer lektin útjának aktiválódási mechanizmusát. A korábbi irodalmi adatokat megcáfolva kimutatták, hogy a MASP-1 szerin proteáz a MASP-2 szerin proteáz kizárólagos aktivátora, és a MASP-1 gátlásával az egész rendszer aktiválódása gátolható. Ennek azért van különösen nagy jelentősége, mert a lektin út patológikus aktiválódása nagymértékben hozzájárul az iszkémia-reperfúzió (pl. szívinfarktus, szélütés) során bekövetkező szövetpusztuláshoz. Az eddigi gyógyszerfejlesztések kizárólag a MASP-2 gátlására koncentráltak, felfedezésük azonban megmutatta, hogy a MASP-1 az igazán fontos célmolekula. A specifikus gátlószerekre szabadalmi bejelentést tettek és a további munkát hazai és külföldi együttműködők bevonásával folytatják.

Meghatározták a több doménes MASP-2 szerin proteáz és a C4 fehérjeszubsztrát komplexének térszerkezetét. Azonosították a CCP doméneken lévő külső kötőhelyet (exosite). Ez áttörésnek számít ezen a területen, mivel eddig nem volt ismert olyan szerin proteáz-szubsztrát komplex szerkezet, ami egy külső (nem proteáz) doménen lévő exosite szerepét demonstrálta volna.

Folytatták humán 3-foszfoglicerát kináz (PGK) nukleotid-specifitását jellemzését és más kinázokkal való összehasonlítását. Megállapították, hogy bár a HIV-elleni terápiában hatásos L-nukleozid-analógok foszforilálását a PGK végzi a kinázok közül a leghatékonyabban, a ribóz-gyűrűt nélkülöző, szintén HIV-gyógyszerként alkalmazott tenofovir enzimátikus foszforilálását a PGK kimutatható sebességgel nem katalizálja.

A *Thermus thermophilus* (Tt) 3-izopropilmalát-dehidrogenáz (IPMDH) quaterner komplexe (IPMDH*Mn*IPM*NADH) kristályszerkezetének analízise során további molekuláris kontaktusokat azonosítottak a két szerkezeti domén határán. Kvantummechanikai (QM)

számításokkal modellezték a működő enzimhez kötött szubsztrátok (IPM és NAD) között lezajló kémiai reakció egyes elemi lépéseit is.

A *Genom Metabolizmus Munkacsoport* igazolta a DNS-beli uracil előfordulását és fejlődésben játszott szerepét ecetmuslicában. Megmutatták, hogy Mycobacteriumban (TBC kórokozó) a dUPáz enzim esszenciális, és ezért egy fajspecifikus hurok felel.

Lizofoszfolipid Munkacsoport jellemezte a szfingozin-kalmodulin kötődés erősségét és a kalmodulin funkcionális gátlását, meghatározták a komplex kristályszerkezetét. Az EPAC1 fehérje DEP-doménjét kifejezték, tisztították és megmutatták, hogy szelektíven köti a szfingozilfoszforilkolint. Részletesen jellemezték egyes rekombináns PH-domének (gelsolin, akt1, grp1, nck1) kölcsönhatását lizofoszfátidsavval *in vitro*.

b) Tudomány és társadalom

A *Jelátviteli Munkacsoport* vezetője a Lendület-pályázat nyertese, így számos fórumon beszámolt kutatásairól, illetve népszerűsítette kutatási területét.

Membránfehérje Bioinformatika Munkacsoport vezetője által tartott bioinformatikai kurzuson a PhD-diákok mellett több, nem szakmabeli kutató is részt vett az MTA TTK-ból, ill. más akadémiai kutatóközpontból is.

A *Fehérjeszerkezet Munkacsoport* eredményei közül a rákos megbetegedésekkel kapcsolatosak számíthatnak szélesebb körű érdeklődésre.

Tudomány és társadalom közötti dialógust jelzi az Élet és Tudomány pályázati felhívására a Sejt Architektúra munkacsoport munkatársa által beküldött cikk közlése és honoráriummal való jutalmazása. „A rendezetlen fehérjék kettős élete: Egészségben és betegségben” című, az OTKA-cikkpályázat keretében kiválasztásra került pályamű megjelenése 2013. januárban várható.

A Genom Stabilitás kutatócsoport vezetője részt vett az MTA és a Magyar Televízió Delta című tudományos ismeretterjesztő műsora által szervezett vetélkedőn, zsűritagként és az egyik középiskolás csapat mentoraként is. Az év során később a vetélkedőn résztvevő csapat gimnáziumának (Szent Orsolya Gimnázium, Sopron) összes kémia fakultációs diákját vendégül látta a kutatócsoport, bemutatta a laboratóriumot, és a diákok által végzett kísérleti gyakorlattal is szemléltette a kutatómunkát.

Membránfehérje Munkacsoport vezetője is részt vett a Magyar Televízió Delta műsora által megrendezett „Lendületben a jövő” című vetélkedőn.

Előadásokat tartottak a „Kutatók Éjszakája” programban. Az előadások címe:

Össejtek tévúton - a daganatok össejtjei

Rákos sejtek nagyító alatt – Gyógyszer-rezisztencia (labor bemutató)

(http://www.kutatokejszakaja.hu/2012/foszereplo/foszereplo.php?menu_id=5&id=1022)

Előadást tartottak a Magyar Tudomány Ünnepe 2012. „A felfedező tudomány felfedezése: kutatóhelyek tárt kapukkal” c. programon.

Az *Aktív Transzportfehérjék Munkacsoport* tagjai két előadást tartottak a TTK Kutatóközponti Tudományos Napokon, az egyik hallgató a Kármán Erika Doktori Iskola keretén belül számolt be tudományos eredményeiről, valamint a csoportvezető az MTA Tárt kapuk rendezvénysorozatán 30 középiskolás diák számára tartott ismeretterjesztő előadást az intézetben.

A *Rendezetlen Fehérje Munkacsoport* számos tudományos rendezvényen vett részt, ezek közé tartoznak a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozatán, valamint a TTK Kutatóközponti Tudományos Napokon tartott előadások.

A *Szerkezeti Biofizika Munkacsoport* vezetője előadást tartott a Magyar Tudomány Ünnepe keretében „Kutatások az MTA Természettudományi Kutatóközpontban” címmel megrendezett szimpóziumon a Magyar Tudományos Akadémián. A lektin út aktiválódási mechanizmusával kapcsolatos eredményünket az MTI is ismertette és az erről szóló tudósítás több népszerű internetes hírportálon (pl. Index, Origo) is megjelent. Ugyanez az eredmény az „Élet és Tudomány” című folyóiratban is ismertetésre került és az MTV Delta című tudományos magazinja helyszíni riportban számolt be róla. A Magyar Tudomány szeptemberi számát a Magyar Biofizikai Társaság 50 éves fennállása kapcsán a csoportvezető szerkesztette. Az Élet és tudomány című folyóirat „Fizika az élő rendszerekben”, míg az Innotéka „Biofizika, a befogadó tudományág” címmel közölt interjút a csoportvezetővel.

A *Lizofoszfolipid Munkacsoport* részt vett a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvényen műszeres bemutatóval, amely során a fiatalok megismerkedhettek a biomolekulák kölcsönhatását mennyiségileg jellemző modern műszerekkel.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A *Jelátviteli Munkacsoport vezetője* a Magyar Biokémiai Egyesület egyik alelnöke, illetve a Jelátvitel Szakosztály társelnöke, ilyen minőségében folyamatosan részt vesz egy egyesület vezetésében, illetve annak programjai szervezésében. Gergely Pál professzorral megszervezte a Jelátviteli Szakosztály 3. Konferenciáját (Esztergom, 2012. október 4-6). 2012-ben folytatódott az együttműködés a munkacsoport és a Richter Gedeon Nyrt. között gyógyszerfejlesztési témakörben. A csoportvezető részt vesz a Semmelweis Egyetemen folyó orvostudományban rendszeres előadások tartásával. Jelenleg 3 PhD-hallgató munkáját irányítja.

A *Funkcionális Genomika Munkacsoport* részt vesz az egyetemi hallgatók oktatásában. A munkacsoport vezetője az alábbi tárgyakat oktatja: „A Genomevolúció és fehérjeevolúció bioinformatikai aspektusai”, „Bioinformatika I”, ELTE TTK Biológushallgatók és doktoranduszok számára. Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok során a FIXPRED projektben együttműködnek a Combit Számítástechnikai Kft., az Albacomp Számítástechnikai Zrt. és a Valdeal Innovációs Zrt.-vel.

Membránfehérje Bioinformatika Munkacsoport vezetője az őszi félévben tartott bioinformatika tárgyú előadást az ELTE MSc és PhD-képzésében, emellett részt vett PhD-szigorlaton vizsgáztatóként és PhD-védésen opponensként. A csoport egy hazai együttműködésben vesz részt: Az Országos Onkológiai Intézet Sebészeti és Molekuláris Daganatpatológiai Központ egyik kutatócsoportjával a formaldehidbe és parafinba ágyazott daganatsejt minták DNS-analízise témában. Ebből az együttműködésből még nem született publikáció.

Fehérjeszerkezet Munkacsoport együttműködik a University of Cambridge (UK) és a Mount Sinai School of Medicine kutatóival, amiből cikkek is születtek. A munkacsoport több munkatársa részt vett hallgatók és doktoranduszok képzésében. A csoportvezető az ELTE Fizika Doktori iskolájának törzstagja.

A *Sejt Architektúra Munkacsoport* jelentős hazai és nemzetközi kapcsolatokkal, kollaborációs aktivitással rendelkezik, mint azt a közös EU-projektek is bizonyítják (ld. a Pályázatok részben). Továbbá a 2012-es évben két külföldi tudóst látott vendégül a csoport a Rouen Egyetemről és a Humboldt Egyetemről. A látogatások célja kollaborációs kapcsolat kialakítása, illetve a meglévő kapcsolat kiterjesztése volt, pl. folyamatban lévő tudományos cikkek közlésekre való elkészítése (ld. Publikációk részben). Ezekon túlmenően fontos momentum volt egy korábbi munkatárs visszatérése, hiszen ő évekig a csoportban dolgozott, itt készítve diplomamunkáját, valamint PhD-tézisét. Sikeres védését követően Svédországban

dolgozott posztdoktorként 3 évig, majd hazatérése után ismét bekapcsolódott a TPPP/p25 kutatásokba, jelenleg pozíció nélküli, „visiting” státuszban dolgozik a munkacsoportban.

Genom Stabilitás Munkacsoport

Téma címe: A tumorsejtek allélikus instabilitásának molekuláris és genetikai okai

Együttműködő partnerintézmény: Department of Systems Biology, Technical University of Denmark

Kapcsolat formája: tudományos együttműködés

Eredmények: Különbféle DNS-javító folyamatok génjeiben mutáns csirke DT40 sejtvonalakban sikerült megvizsgálni a spontán, ill. a DNS-károsodás által indukált genom instabilitást. A kutatómunka folytatódik, az eredmények értékelése folyamatban van.

Membránfehérje Munkacsoport

Achilles pályázat (4-1621-2011) konzorciumi ülés, december 7-8, 2012, Lyon, Franciaország

AddMal grant (4-1622-2009), konzorciumi ülés, október 24-25, 2012 Budapest

Egy vendéghallgató Bonnól.

Aktív Transzportfehérjék Munkacsoport

Téma címe: „Az ABCC6 szerepe az akut és krónikus érrendszeri meszesedésben”

Együttműködő partnerintézmény neve: Department of Cell and Molecular Biology; John A. Burns School of Medicine, University of Hawaii, USA

Egyezmény neve: NIH R01 pályázat, 1R01HL108249-01A1

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: A magyar kutatócsoport végezi a humán, betegséget okozó ABCC6 mutációk karakterizálását *in vitro*, mivel az ehhez szükséges kísérleti feltételeket is ez a csoport dolgozta ki, és állította be: a vektor konstrukciók előállítását, a fehérje Sf9 sejtekben történő overexpresszáltatását, ún. kifordított vezikulák preparálását, az ABC fehérjék transzport kinetikájának vizsgálatát. A hawaii egyetemen az ABCC6 mutánsokat *in vivo* expresszáltatták egerekben. Az együttműködés keretén belül a két csoport a mutánsok sejten belüli lokalizációját *in vitro* és *in vivo* is meghatározta. Ezen kívül egy egéretetéses kísérletet is végeztek, amely során a magyar csoport végezte a K vitamin koncentrációjának meghatározását szérum mintákban. Ezekkel a kísérletekkel sikerült igazolniuk, hogy az ABCC6 nem játszik kulcsszerepet a K vitamin metabolizmusában.

Közös publikációk száma: 2012-ben 2 db (beleszámítva az elfogadott kéziratokat).

2012 folyamán a *Rendezetlen Fehérje Munkacsoport* sikeresen meghosszabbította a Koreai Tudományos Akadémiával folyó közös együttműködését, melynek keretében a közös kutatást és a kapcsolattartást anyagilag a koreai fél támogatja. Ennek a pályázatnak a keretében több koreai kutató is érkezett az Enzimológiai Intézetbe, és átlagosan egy hónapot töltöttek itt. A magyar kutatócsoport tagjai is látogatást tettek Koreában, részt vettek a Koreai Biokémiai Társaság éves gyűlésén, valamint az Első Kelet-Ázsiai Rendezetlen Fehérje szimpóziumon. A kutatócsoport szoros kapcsolatot tart fenn több egyetemi tanszékkel is, melyek közé tartozik az ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratóriuma, ahol az NMR vizsgálatok folynak. Az NMR mérések képezik a rendezetlen fehérjék szerkezeti vizsgálatának gerincét, ezért a legtöbb kutatási témában nélkülözhetetlenek.

A Rendezetlen Fehérje munkacsoport kutatói részt vesznek az ELTÉ-n, a BME-n és a Pázmány Péter Katolikus Egyetem doktori képzésében. Az ELTE doktori képzésében egy rendezetlen fehérjéről szóló PhD-kurzust tartanak.

Téma címe: The role of pre-structured motifs (PreSMos) in the promiscuous interactions of intrinsically unfolded protein

Együttműködő partnerintézmény neve: Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology, Daejeon, Korea

Egyezmény neve: Korea Hungary Joint Laboratory Program

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az együttműködés keretében a thymosin β 4 és partnereinek komplexeit jellemezték, valamint a rendezetlen fehérjékben található felismerő szekvenciák (PreSMos) bioinformatikai elemzését is elvégezték. Szintén az együttműködés keretében jellemezték a Nopp140 rendezetlen fehérjét biokémiai és biofizikai szempontból.
Közös publikációk száma: 2

Téma címe: Rendezetlen fehérjék szerepe a Nonsense mediated decay folyamatában
Együttműködő partnerintézmény neve: Mezőgazdasági Biotechnológiai Kutatóközpont, Gödöllő, Magyarország
Egyezmény neve: Tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: az MBK-ban lévő egyik csoport már évek óta foglalkozik az NMD folyamatának élettani vizsgálatával növényekben. Ebbe kapcsolódtak bele, a folyamatban szerepet játszó fehérjék szerkezeti vizsgálatával. Közös munkából már született egy közlemény, melyben a rendezetlen fehérjék NMD-ben betöltött kulcsszerepét bizonyítják, jelenleg rendezetlen régiókon belüli kötőmotívumokat keresnek.
Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Rendezetlen fehérjék szerepe a biomineralizációban
Együttműködő partnerintézmény neve: Semmelweis Egyetem Orálbiológiai Tanszék, Budapest, Magyarország
Egyezmény neve: Tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Varga Gábor a csont és fogképződés élettanának egyik hazánkban és nemzetközileg is elismert kutatója. Miután ebben a folyamatban egy fontos lépésben kizárólag rendezetlen fehérjék szerepelnek, a rendezetlenség szerepének tisztázására alakult ki az együttműködés. A közös munka 2012-ben zárult le, eredményeiket egy színvonalas nemzetközi publikációban foglalták össze.
Közös publikációk száma: 1

Téma címe: A Shadoo fehérje részletes szerkezeti elemzése
Együttműködő partnerintézmény neve: Szegedi Biológiai Kutatóközpont Biokémiai Intézet, Magyarország
Egyezmény neve: Tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Egyik kutatójuk a nemrég felfedezett Shadoo fehérje (a prion fehérjéhez hasonló szekvenciájú fehérje) élettani, biokémiai vizsgálatával foglalkozik. Az együttműködésben bioinformatikai módszereket felhasználva próbálják azonosítani potenciális funkcióval rendelkező szerkezeti egységeket.
Közös publikációk száma: 1 (beküldött)

Téma címe: Micro RNS-ekben található SNP-k szerepe a depresszió kialakításában
Együttműködő partnerintézmény neve: Semmelweis Egyetem Gyógyszerhatástani Intézet
Egyezmény neve: Tudományos együttműködés
Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az egyik csoporttal együttműködésben olyan SNP-ket keresnek, melyek a miRNS-ek kialakulásának, vagy bekötődésének helyén vannak, és befolyásolhatják a miRNS kötődését. A csoport feladata bioinformatikai módszerekkel a miRNS-ek kialakulási helyének és kötődési helyének megtalálása a releváns géneken, illetve az ott található SNP-k kikeresése. Az együttműködés 2012-ben indult, így még publikált eredmények nincsenek.

Téma címe: EEG vizsgálatokból származó nagy mennyiségű adat tárolása és feldolgozása
Együttműködő partnerintézmény neve: Semmelweis Egyetem Gyógyszerhatástani Intézet

Egyezmény neve: Tudományos együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az előző témában említett csoporttal egy másik együttműködés is folyik, ebben kizárólag informatikai, bioinformatikai segítséget nyújtunk a vizsgálataik során keletkező nagy mennyiségű adat kiértékeléséhez, feldolgozásához.

Közös publikációk száma: 1 (elfogadott) + 2 (beküldött)

Szerkezeti Biofizika Munkacsoport

Téma címe: Baktériumokban termeltetett rekombináns fehérjék kijuttatása a sejtekből a flagelláris exportapparátus segítségével

Együttműködő partnerintézmény neve: Pannon Egyetem, Bio-Nanorendszerek Laboratórium, Veszprém

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: A flagelláris exportrendszer felhasználásán alapuló olyan fehérjeexpressziós eljárást dolgoztak ki, amelynek segítségével a baktériumokban nagy mennyiségben termeltetett rekombináns fehérjék működőképes formában kijuttathatók a sejtekből, s azok feltárása nélkül a sejtkultúra folyadékából könnyen összegyűjthetők.

Közös publikációk száma: 2

Téma címe: Az IPMDH szerkezet-működés kapcsolatának felderítése

Együttműködő partnerintézmények neve:

MTA TTK Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet (krisztallográfia)

MTA-BME Anyagszerkezet és Modellezési Kutatócsoport, (kvantummechanikai számolások)

Egyezmény neve: tudományos együttműködés

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az IPMDH működését kísérő alloszterikus változások vizsgálatára előállították a *Thermus thermophilus* (Tt) IPMDH*Mn*IPM*NADH komplex kristályát és meghatározták annak 2 Å felbontású szerkezetét. Ez a nem működő inaktív komplex jól modellezi a működő aktív IPMDH*Mn*IPM*NAD komplexet. Fontosabb jellemzői a domének teljesebb záródása és a kötött szubsztrát kötőszögeinek megváltozása a korábbról ismert IPMDH*Mn*IPM komplexben megfigyeltékhez képest. A kötött IPM újonnan megfigyelt konformációjának előnyeit a katalizált kémiai folyamat szempontjából kvantummechanikai számításokkal is alátámasztották (kézirat előkészületben).

Téma címe: A bakteriális 3-izopropilmalát dehidrogenáz szerkezeti-funkcionális vizsgálata

Együttműködő partnerintézmények neve: Helmholtz Centre, Berlin, Németország, egy kutató(krisztallográfia), University of Parma, Institute of Molecular Biology, Olaszország, egy kutató (mikrospektrofotometria)

Egyezmény neve: OTKA Nemzetközi Együttműködési Kutatási pályázat

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az enzimműködést kísérő alloszterikus konformációváltozások (pl. doménmozgások, ill. az alegységek közötti információ-átadás) mechanizmusa szerkezeti alapjainak felderítésére kristályos állapotban előállították a *Thermus thermophilus* IPMDH apoenzimet, továbbá az IPMDH*Mn, IPMDH*Mn*IPM, az IPMDH*Mn*NAD, IPMDH*Mn*NADH és az IPMDH*Mn*IPM*NADH stabil komplexeket. A kristályok röntgendiffrakciós jellemzése és szerkezet megoldása is megtörtént. A szerkezetek összehasonlító molekuláris grafikai analízise képet adott az enzim-szubsztrát komplexekben lejátszó konformációváltozások sorozatáról.

Az együttműködés során a különböző IPMDH-szubsztrát komplexek mikrospektrofotometriás mérésére is sor került. Ezekkel a kiegészítő vizsgálatokkal ellenőrizték az IPMDH működőképességét a kristályban. A vizsgálatok alapján releváns következtetések vonhatóak le az enzimműködés szerkezeti részleteit illetően.

Téma címe: A *Thermus thermophilus* (Tt) 3-izopropilmalát dehidrogenáz konzervatív oldalláncainak mutációja által okozott konformációs változások tanulmányozása kisszögű röntgen szórással (SAXS).

Együttműködő partnerintézmény: EMBL, Hamburg, Németország, Dmitri Svergun and Peter Konarev (SAXS)

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): BioStructx_1064

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: A vad típusú és mutáns IPMDH enzimek apo, IPMDH*Mn*IPM*NAD (működő terner komplex) és IPMDH*Mn*IPM*NADH (nem működő terner komplex) formáinak konformációját kisszögű röntgenszórás módszerével vizsgálták. Az adatok kiértékelése során megállapították, hogy az összes mutánsnál (a K185A mutáns kivételével) mind a működő, mind a nem működő terner komplex esetében csökkent mértékű doménzáródás volt megfigyelhető. A K185A mutáns mérési adatai meglepő eredményt mutattak. A Mn*IPM*NADH-val alkotott komplex doménjei csak részben záródtak a vad típusúhoz képest, míg a Mn*IPM*NAD kötődése a domén záródás mértékét nagymértékben megnövelte. A jelenség magyarázatához a kristályszerkezetek további analízise és oldatkísérletek szükségesek.

Genom Metabolizmus Munkacsoport

FEBS3+ Meeting: From molecules to life and back szervezése, Opatija, Horvátország, FEBS támogatással.

Lizofosfolipid Munkacsoport

Téma címe: Biofizika MSc-hallgatóknak

Együttműködő partnerintézmény (egyetem) neve: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): féléves előadás MSc-képzésben

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat megnevezése (formája): MTA Lendület-pályázat (LP2012-35/1/2012)

A pályázati téma megnevezése: A transzmembrán fehérjék szerkezetének vizsgálata újfajta bioinformatikai eszközökkel

A pályázati támogatás mértéke: 204 M Ft, (2012-ben: 61 M Ft)

A pályázat megnevezése (formája): OTKA (K104586)

A pályázati téma megnevezése: Dimenzióváltás a transzmembrán fehérjék szerkezet-kutatásában

A pályázati támogatás mértéke: 44 M Ft, (2012-ben: 11 M Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: 2 cikk, 16 impakt faktor

A pályázat megnevezése (formája): MEDA Pharma GmbH & Co. KG, Hamburg, Dr. Joachim Maus, Director Clinical Development

A pályázati téma megnevezése: Reumacon és származékainak (AS3738 and AS3739) jellemzése a vegyületek anti-mikrotubuláris potenciáljának vonatkozásában

A pályázat azonosítószáma: 4-1391-2012 4113 KE

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2012-ben): 3000 EUR, 3000 EUR

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: A vizsgálatok célja a Reumacon és származékainak (AS3738 and AS3739) jellemzése, elsődlegesen a vegyületek anti-mikrotubuláris potenciáljának vonatkozásában. A feladat teljesítésének igazolását, az eredmények értékelését írásos beszámoló mutatta be a megrendelőnek.

A pályázat megnevezése: OTKA alapkutatói pályázat (K 104227)

A pályázati téma megnevezése: Egy gén, számos betegség: az ABCC6 szerepe az érfalak meszesedésében

A pályázati támogatás mértéke: 2013. január 1-jén indul.

A pályázat megnevezése: Piacorientált kutatási tevékenység támogatása a közép-magyarországi régióban (KMR 12-1-2012-0074)

A pályázati téma megnevezése: Kinázgátló hatóanyagok fejlesztése vesefibrózis és diabéteszes nefropátia kezelésére

A pályázati támogatás mértéke: 40 M Ft (2012: 0 Ft)

A pályázat megnevezése: MTA Infra (IF-28/2012)

A pályázati téma megnevezése: Hungarian Automated Macromolecular Crystallization and X-ray Crystallography Platform for the 21th Century

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2012-ben): 120 M Ft

A pályázat megnevezése: PD OTKA (PD 105049)

A pályázati téma megnevezése: A thymosin beta-4 szerkezeti adaptációja különböző partnereihez

A pályázati támogatás mértéke: 25 M Ft (2012: 8 M Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: A thymosin $\beta 4$ szerkezetének vizsgálata történt különböző partnereivel alkotott komplexekben. A vizsgálatok közé tartozott az NMR, a SAXS, az ITC és egyéb technikák. A kapott eredmények publikációja jelenleg folyamatban van.

A pályázat megnevezése: OTKA posztdoktori pályázat (PD 104344)

A pályázati téma megnevezése: GAP43-kalmodulin kölcsönhatás szabályozása a szfingozin és lizofoszfátidsav jelátviteli lipidekkel

A pályázati támogatás mértéke: 21 M Ft (2012: ~2,2 M Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: Jellemezték a szfingozin-kalmodulin kötődés erősségét és a kalmodulin funkcionális gátlását, meghatározták a komplex kristályszerkezetét.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tompa P: On the supertertiary structure of proteins. *Nat Chem Biol*, 8(7): 597-600 (2012)
2. Tompa P: Intrinsically disordered proteins: a 10-year recap. *Trends Biochem Sci*, 37(12): 509-516 (2012)
3. Héja D, Kocsis A, Dobó J, Szilágyi K, Szász R, Závodszy P et al. (2, Gál P): Revised mechanism of complement lectin-pathway activation revealing the role of serine protease MASP-1 as the exclusive activator of MASP-2. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 109: 10498-10503 (2012)
4. Kidmose RT, Laursen NS, Dobó J, Kjaer TR, Sirotkina S, Yatime L et al. (4, Gál P): Structural basis for activation of the complement system by C4 cleavage. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 109: 15425-15430 (2012)
5. Muha V, Horváth A, Békési A, Pukáncsik M, Hodoscsek B, Merényi G et al. (7, Róna G, Batki J, Vértessy BG): Uracil-containing DNA in *Drosophila*: stability, stage-specific accumulation, and developmental involvement. *PLoS Genet*, 8(6): e1002738 (2012)

6. Kozma D, Simon I and Tusnády GE: CMWeb: an interactive on-line tool for analysing residue-residue contacts and contact prediction methods. *Nucleic Acids Res*, 40: W329-333 (2012)
7. Ratajewski M, de Boussac H, Sachrajda I, Bacquet C, Kovács T, Váradi A et al. (2, Arányi T): ABCC6 Expression Is Regulated by CCAAT/Enhancer-Binding Protein Activating a Primate-Specific Sequence Located in the First Intron of the Gene. *J Invest Dermatol*, 132:(12) 2709-2717 (2012)
8. Pesti S, Balázs A, Udupa R, Szabó B, Fekete A, Bögel G et al. (1, Buday L): Complex formation of EphB1/Nck/Caskin1 leads to tyrosine phosphorylation and structural changes of the Caskin1 SH3 domain. *Cell Commun Signal*, 10(1): 36 (2012)
9. Bogel G, Gujdar A, Geiszt M, Lanyi A, Fekete A, Sipeki S, et al. (2, Buday L): Frank-ter Haar syndrome protein Tks4 regulates EGF-dependent cell migration. *Journal of Biological Chemistry*, 287(37): 31321-31329 (2012)
10. Héja D, Harmat V, Fodor K, Wilmanns M, Dobó J, Kékesi KA et al. (3, Závodszky P, Gál P): Monospecific inhibitors show that both mannan-binding lectin-associated serine protease (MASP)-1 and -2 are essential for lectin pathway activation and reveal structural plasticity of MASP-2. *Journal of Biological Chemistry*, 287(24): 20290-20300 (2012)

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

KOGNITÍV IDEGTUDOMÁNYI ÉS PSZICHOLÓGIAI INTÉZET

1132 Budapest, Victor Hugo u. 18-22.; 1394 Budapest, Pf. 398.

telefon: (1) 354 2290; fax: (1) 354 2416

e-mail: czigler.istvan@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A szenzoros emlékezet kutatása a látásban és a hallásban. A hallás esetében különös tekintettel a hangforrások automatikus szelekciójára, valamint az automatikus és figyelmi hatások kölcsönhatására. A látás területén a szenzoros emlékezeti rendszer sajátosságainak vizsgálatára.

Beszédmegértési kutatások. Szavak akusztikus és vizuális feldolgozásának neurokognitív vizsgálata. Prozódia szerepének vizsgálata a megértésben, és ennek idegrendszeri mechanizmusai.

Speciális környezeti feltételek mellett az észlelés és a kommunikáció elemzése pszichofiziológiai és narratív pszichológiai módszerekkel.

Munkaemlékezeti folyamatok agyi mechanizmusainak hálózat-alapú elemzése.

Epilepsziás agyi működés *in vitro* és *in vivo* elemzése. A terület mérés technikai lehetőségeinek fejlesztése, szinkron populációs aktivitás elektrofiziológiai vizsgálata *in vitro* patkány és emberi hippocampusban.

Az időszedéssel járó kognitív változások kompenzációjának lehetőségei és e folyamatok követése pszichofiziológiai módszerekkel.

Anya-gyermek kommunikáció és korai emóció-felismerés vizsgálata, evolúciós-összehasonlító etológiai vizsgálatok a társas viselkedés alapjelenségeiről.

A szabályos és szabályáthágó versengés társadalmi következményei.

A nemzeti identitással kapcsolatos kommunikáció narratív pszichológiai elemzése.

A pszichoanalízis történeti szempontú vizsgálata.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Kidolgozták a hangforrások észlelésbeli szétválasztásának prediktív szabályosság-reprezentációkra épülő modelljének komputációs elveit. Az ezeken az elveken alapuló komputációs modellek elősegíthetik az intelligens hallókészülékek kifejlesztését.

Demonstrálták, hogy a saját cselekvés által kiváltott hangokhoz kapcsolódó sajátos idegrendszeri feldolgozási mintázat a korábbi elképzelésekkel szemben nem a cselekvés és a hang közötti oksági viszony kognitív leképeződését, hanem azok idői közelségét tükrözi.

Megmutatták, hogy a hallórendszerben vannak magasabb rendű akusztikus változások detekciójára specializált alrendszerek.

Kimutatták, hogy az automatikus (figyelmi folyamatokat nem igénylő) vizuális emlékezeti rendszer érzékeny észlelési kategóriákra, mint a szimmetria, arcokon mutatkozó érzelmek, és időbeli szabályszerűségekre. Az eredmények szerint ez a nem-tudatos rendszer, mint „egyszerű intelligencia” működik, és lényeges szerepet játszik a valóságghú észlelésben.

Az időskori idegrendszeri működések vizsgálatakor hálózati elemzési módszereket alkalmazva a domináns félteke frontális régiójának megfelelően észleltek optimalizált hálózat-átrendeződést, úgy találták, hogy enyhe kognitív zavarral rendelkező személyeknél

egyes agyi régiók (ill. az azokon belül azonosítható ún. modulok) kapcsolatai az idő elteltével romlanak. Fiatalokban és idősekben eltérő idegrendszeri hálózatok aktiválódtak a vizuális érzelmi ingerek feldolgozása során. Az eredmények szerint a hanyatló emlékezeti funkció háttérében egyes agykérgi területeken tapasztalható csökkent magas frekvenciájú szinkronizáció állhat.

A szóhangsúly feldolgozásával kapcsolatos vizsgálatok megállapították, hogy a beszéd-szintetizátorral létrehozott normál és sértett hangsúlyú szavak és álszavak preattentív feldolgozása során az agyi elektromos válaszok komplex módon tükrözik a hangsúlyban és a lexikalitásban történő eltéréseket.

A multiszenzoros integráció (hasbeszélő hatás) kapcsán végzett kutatások feltárták, hogy az integrációt befolyásolja a jelek intenzitása. Egy olyan feladatban, amelyben a résztvevők feladata a hang irányának meghatározása volt, miközben egyszerre láttak és hallottak különböző intenzitású ingereket, azt találták, hogy csak a nagy intenzitású vizuális jel térítette el a hang lokalizációját.

Az ADHD (figyelemhiányos/hiperaktivitás zavar) viselkedéses megjelenése kapcsán végzett kutatások kimutatták, hogy a kérdőíves felméréssel vizsgált tünetek súlyossága alapján több alcsoport is elkülöníthető, melyek hasonló látens struktúrát mutatnak mind a szülői, mind a tanári beszámolók alapján. A vizsgálat felhívja a figyelmet a klinikai diagnózisban nem részesülő, de szubklinikai ADHD szimptomákat mutató csoport létezésére.

Új, nedves kémiai marási módszert dolgoztak ki az MTA TTK MFA együttműködésével, sok kontaktusú szilícium alapú neurális interfész megvalósítására. Állatkísérletes eredmények szerint az eszköz igen jó elektrofiziológiai tulajdonságokkal rendelkezik, nagy pontossággal képes mérni a helyi mezőpotenciálokat valamint az egysejt és többsejt aktivitást.

Összehasonlító viselkedéselemzési kutatások szerint emberek és a kutyák szociális készségei hasonlóak, például a kutyák és a 6-24 hónapos gyerekek szocio-kognitív képességeit vizsgáló tanulmányok eredményei nagymértékű hasonlóságot mutatnak. E párhuzamnak evolúciós okai lehetnek, melyet vizsgálataink összefoglalásaként részletesen kívántunk igazolni. A társasan ráutaló referenciális (osztentív) jelzésekre a kutyák is érzékenyen reagálnak, mint ezt elsőként alkalmazott szemmozgás-regisztációs eljárásukkal kimutatták.

Kimutatták, hogy 18–24 hónapos gyermekeknél a demonstrátornak tulajdonított kompetencia (gyerek vs. felnőtt) és a demonstráció során alkalmazott osztentív kommunikáció egymástól nem független módon befolyásolja a megfigyelő kisgyermek utánzási hajlandóságát. Mindez a kora gyermekkori társas tanulás folyamatainak egy új aspektusára világít rá.

A médiapszichológiai kutatásokban kimutatták, hogy a filmbefogadó kötődési jellemzői, érzelmi intelligenciája a film narratívájával interakcióban befolyásolja a nézőnek a fikciós karakterrel kialakított kapcsolatát és a néző pszichofiziológiai válaszait. A kutatás eredményei a médiapszichológia azon aktuális nemzetközi trendjéhez kapcsolódnak, amelyek narratív művészeti alkotásokkal kapcsolatosan megélt esztétikai élményt vizsgálják.

A pszichoanalízis-történeti kutatások során befejezték és a londoni Karnac kiadóhoz közlésre benyújtották Ferenczi Sándor és Ernest Jones 1911 és 1933 közötti levelezésének angol nyelvű, bevezetését és jegyzetekkel ellátott változatát.

Segítő szakembereknél a másodlagos traumatizáció és kiégés vizsgálatában feltárták, hogy a páciens negatív érzéseinek átvétele a szakember emocionális kimerüléséhez, illetve a személyes hatékonyság érzésének csökkenéséhez vezethet. Az empátiás törődés és decentralizációs képesség azonban meghatároz egy olyan kapcsolati attitűdöt, mely növeli a

személyes hatékonyság érzését és csökkenti a személytelen bánásmód megjelenésének esélyét.

Általános elméleti modellt dolgoztak ki a történelmi pálya és a nemzeti identitás összefüggéséről. Létrehozták a NarrCat nevű, magyar nyelvű egyéni és csoportelbeszélések elemzésére szolgáló, több számítógépes nyelvészeti platformot egyesítő narratív pszichológiai tartalomelemző szoftvercsomagot, mely nem csupán a narratív pszichológiai szempontból releváns szó- és kifejezés kategóriákat elemzi (pl. érzelem, ágens, értékelés, idő, stb.), hanem az elbeszélések szereplőinek tematikus szerepét is meghatározza. A módszert alkalmazva a magyar nemzeti identitás szociálpszichológiai konstrukciójának vizsgálatában kimutatták a kollektív áldozati szerepre jellemző szerveződési módokat, mely meggátolja, hogy a csoport szembenézzen saját vétkeivel és hibáival és olyan érzelmeknek adjon helyet, mint a megbánás.

Nemzetközi együttműködésben a Mars-500 űranalóg kísérlet adatait elemezve kimutatták, hogy orosz és angol nyelvű legénységi kommunikációban a legénység autonómiája szignifikánsan növekszik, időtudatosságuk azonban az ingerszegény időintervallumokban csökken.

A versengés egyik legfontosabb jellemzője, hogy a felek betartják vagy áthágnak a szabályokat. Az eredmények szerint a szabálytartó versengést elősegíti, ha mind a formális, mind az informális versengés szabályai világosak, transzparenssek, ha a versengés nem nagyon intenzív, ha a versengés élvezetes és pozitív stresszt okoz, és ha a versengő felek között együttműködés, bizalom és jó kommunikáció van. Minél intenzívebb a versengés és minél rosszabb a kapcsolat a versengő felek között annál inkább hajlamosak a felek áthágni a szabályokat és immorális és illegális eszközöket alkalmazni.

Magyar, kínai és Magyarországon élő kínai diákok tanuláshoz és versengéshez kapcsolódó koncepcióinak összehasonlítása feltárta, hogy a Magyarországon élő kínai gyermekek koncepciói mind a kínai, mind magyar társaikétól eltérő képet mutatnak. Az eredmények először világítanak rá az akkulturációs folyamatok lehetséges moderátor szerepére a fogalomfejlődés folyamatában. A különböző fogalmak jelentéstartalmának ismerete hozzájárulhat a hazai oktatásszervezés hatékonyságának növeléséhez és a kultúra érzékeny pedagógia megvalósulásához.

b) Tudomány és társadalom

Az öregedéssel együtt járó, elsősorban pszichológiai (pszichopathológiai) folyamatok kutatásának elméleti súlyán túl a kérdés gyakorlati jelentősége nyilvánvaló, lévén, hogy a népesség életkora nő, ami számos gazdasági, szociális, egészségügyi, pszichológiai vonatkozású problémát hoz magával. E kutatásokból több népszerű előadást tartottak, és ez volt az egyik témája az ELTE Pszichológiai Intézet egész napos nyilvános tudományos fórumának valamint a „TTK Tudományos Napok” rendezvénynek. A versengés életkori (idős korral kapcsolatos) változásairól a „Harmadik Kor Egyetemén” (ELTE) tartottak előadást.

Az olvasás tipikus és atipikus fejlődésének kutatási területén elért eredmények a pedagógiai gyakorlat (mérés-értékelés) számára elérhető formában váltak részévé az írás-olvasás nemzeti standardjait alapozó, magyar és angol nyelven hozzáférhető szerkesztett köteteknek és könyvfejezeteknek.

Az identitás szerveződése és állapotai a közgondolkodás számos jelenségére magyarázati lehetőséget kínál. Ezekről a lehetőségekről tartottak előadást 2012 májusában Pécsen a *Magyar Történelmi Társulat* bünbakképzéssel foglalkozó rendezvényén. E kutatások a

magyarságtudat empirikus vizsgálatába újszerű metodikát, a tudományos narratív elemzés módszerét vezette be.

Az összehasonlító viselkedéskutatást mind a hazai mind a külföldi média érdeklődésével kísérte. Számos online hírportál (MTI Központi Hírszolgálat, Origo, Reuters, Discovery News Science Now, New Scientist, LiveScience) adott hírt riport vagy közlemény formájában az eredményekről, továbbá hazai és külföldi napilapok és folyóiratok (pl. New York Times, Sydney Morning Herald, Magyar Nemzet, HVG) közöltek a kutatásokkal kapcsolatos interjút. A kutatásokról magyar és külföldi rádió és tv-csatornák is készítettek beszélgetéseket beszámolókat (pl. MTV1, TV2, RTL KLUB, Kossuth Rádió, CBS News Radio). A várhatóan 2013 tavaszán bemutatásra kerülő tudományos ismeretterjesztő film világszerte több kutatócsoport munkájának megfilmesítésével készült, és az állati illetve emberi gondolkodás sajátosságaihoz próbálja közelebb vinni a laikus érdeklődőket.

A longitudinális anya-gyermek kapcsolatokat vizsgáló kutatásokról hosszabb beszélgetés, előadás („Ezer arc, ezer talantum” című programsorozatban) és népszerűsítő cikk jelent meg (Élet és Tudomány).

A IV. Magyar Pszichoanalitikus filmkonferencián, melyeken több kutató vett részt, a kerekasztal beszélgetéseken és műhelyekben aktuális társadalmi kérdések (pl. romákkal, menekültekkel, nőkkel szembeni megkülönböztetés) kerültek szóba.

2012 őszétől LMBTQ (leszbikus, meleg, biszexuális, transznemű és queer témájú) pszichológiai olvasószeminárium indult mentálhigiénés szakemberek, pszichológusok részére.

A Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozat részeként szervezett *Érzelem, kogníció, társadalom* (2012. november 14.) konferencián bemutatták az érzelmek narratív szerveződésére vonatkozó illetve a nemzeti identitás kategória érzelmi összetevőit azonosító vizsgálatok eredményeit, valamint összefoglalták az érzelmekkel kapcsolatos idegtudományos eredményeket.

A Kutatók éjszakáján – *Urak és hölgyek az űrben* – előadásokkal és kerekasztal beszélgetésekkel vettek részt.

A versengéssel kapcsolatos kutatások a gazdasági élet egyik centrális kérdését érintik. E kutatásokról népszerű cikk (Élet és Tudomány, Mindennapi Pszichológia) jelent meg és előadásokat tartottak. A témakör több mint 15 alkalommal szerepelt különböző rádióműsorokban. Egyik kutatójuk az év során több mint 15-ször szerepelt különböző rádióműsorokban (elsősorban Kossuth Rádió Tudományos Szerkesztősége által szerkesztett műsorokban és a Közelről című műsorban).

A Magyar Tudomány ünnepének kiemelt rendezvényeként a Lendület program díjnyertesei között munkatársuk előadással szerepel: Mielőtt megtanulunk beszélni – A kommunikáció előfeltételei csecsemőknél.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai kapcsolatok

Téma címe: A kutya és ember szociokognitív képességeinek összehasonlító vizsgálata
Együttműködő partnerintézmény: ELTE Etológia Tanszék, Budapest
Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): Kutatási kollaboráció, közös kísérletek végzése a prof. Miklósi Ádám vezette kutatócsoporttal

Eredmények, ill. együttműködés értékelése (néhány sorban): Az évek óta folyó közös kutatások továbbra is sikeresen zajlanak, számos új kutatási irány került ebben az évben is kidolgozásra.

Közös publikációk száma: 5

Téma címe: A szociális kategorizáció szerepe a csecsemők és kisgyermekek kulturális tanulási folyamataiban

Együttműködő partnerintézmény: ELTE PPK Kognitív Pszichológiai Tanszék, Budapest

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): Kutatási kollaboráció közös PhD-hallgató bevonásával, a Dr. Király Ildikó vezette kutatócsoporttal

Eredmények, ill. együttműködés értékelése: Az évek óta folyó közös kutatások továbbra is sikeresen zajlanak, számos új kutatási irány került ebben az évben is kidolgozásra.

Közös publikációk száma: 2 (benyújtott kézirat)

Felsőoktatási kapcsolatok (BA, MA, PhD-képzésben való részvétel):

ELTE, Pedagógiai és Pszichológiai Kar

ELTE, Társadalomtudományi Kar

ELTE, Természettudományi Kar

PTE, Pszichológiai Intézet

Szegedi Tudományegyetem, Pszichológiai Intézet

Semmelweis Egyetem, Egészségtudományi kar

PPKE, Információs Technológiai Kar

KGRE, Pszichológiai Intézet

További tudományos együttműködések a 2012-ben megjelent közlemények alapján:

MTA KOKI, Budapest, Magyarország

MTA TTK MFI, Budapest, Magyarország

MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest, Magyarország

Nemzetközi kapcsolatok

Téma címe: Hallási és vizuális észlelés

Együttműködő partnerintézmény: Universität Leipzig, Németország

Egyezmény neve: DAAD-MÖB megállapodás

Eredmények: Mindkét részről számos hosszabb cserelátogatás közös kísérletek tervezésre és lebonyolítására céljából.

Közös publikációk száma: 4

Téma címe: Kognitív funkciók neurális hálózatainak elektrofiziológiai elemzése

Együttműködő partnerintézmény: Department of Clinical Neurophysiology, VU University Medical Centre, Amszterdam, Hollandia.

Egyezmény neve (vagy a kapcsolat formája): Informális; a holland és magyar laboratóriumok vezetői mintegy két évtizede rendeznek közösen konferenciákat, illetve szimpóziumokat, látják vendégül egymás munkatársait.

Eredmények: Az elsősorban a holland együttműködő fél által kifejlesztett, neuronális hálózatok vizsgálatára alkalmas EEG-alapú elemző rendszer hazai továbbfejlesztése különösképpen alkalmas kognitív folyamatok elemzésére. Ennek egyik vonatkozása a kiváltott potenciálok egyes komponenseivel összefüggésbe hozható tranzienst hálózat-karakterisztikumok analízisének Magyarországon megvalósított lehetősége.

Közös publikációk száma: Eddig megjelent: 2 (2012-ben 1); elbírálás alatt: 2.

Téma címe: Sokcsatornás regisztráló rendszerek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmények: IMEC, Leuven, Belgium; IMTEK, Freiburg, Németország

Egyezmény neve: kutatási együttműködés

Eredmények: Akut, illetve krónikus sokcsatornás regisztráló rendszerek fejlesztése és tesztelése altatott rágcsálókban. Elektronikus mélységszabályzós elektróda használata idegrendszeri kutatásokban: agyi oszcillációk során detektálható sejtaktivitás vizsgálata és összehasonlítása különböző talamikus és agykérgi területeken. A kutatási és teszteredmények alapján a rendszerek további fejlesztése.

Közös publikációk száma: 8 (2012-ben 1)

Téma címe: Studying the associations between oxytocin receptor gene (OXTR) polymorphism and social behaviour in dogs. (Az oxytocin receptor gén (OXTR) polimorfizmus és a szociális viselkedés kapcsolatának tanulmányozása kutyáknál)

Együttműködő partnerintézmény: Messerli Research Institute, University of Veterinary Medicine Vienna, Ausztria

Egyezmény neve: Kutatási kollaboráció, közös kísérletek végzése

Eredmények: Egy tervezett közös kísérlet elvégzésre került, további közös vizsgálatok jelenleg is folynak párhuzamosan mindkét helyszínen.

Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Effects of intranasal oxytocin on emotional face processing in dogs. (Az intranasalis oxytocin hatása érzelmet kifejező arcok feldolgozására kutyáknál)

Együttműködő partnerintézmény: College of Veterinary Medicine, University of Helsinki, Finnország

Egyezmény neve: Kutatási kollaboráció a prof Outi Vainio által vezetett csoporttal, közös kísérletek végzése

Eredmények: A tervezett közös kísérlet elvégzésre került, az ebből készülő kézirat előkészítése zajlik

Téma címe: Shame and Guilt through a Cross-cultural Lens. (A szégyen és büntudat kulturális összehasonlításban)

Együttműködő partnerintézmény: Ghent University, Belgium, University of Geneva, Svájc, University of Helsinki, Finnország

Egyezmény neve: közös kutatás, finanszírozása a University of Ghent részéről történik

Eredmények: Az adatok felvétele befejeződött, feldolgozásuk most kezdődik.

Hosszabb ideig az intézetben tartózkodó vendégkutatók:

Alexandra Bendixen (1 hónap), Lidia Sesztopalova (4 hónap).

Ipari kapcsolatok:

Provalis Research, Montreal, Kanada, a Regresszív Képzelt Szótár magyar nyelvű változatának kidolgozása

További tudományos együttműködés a 2012-ben megjelent közlemények alapján:

Center for Complex System Studies, Kalamazoo College, MI, United States

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

A pályázat megnevezése: Lendület 2012 (LP2012-36/2012)

A pályázati téma megnevezése: Who is talking? Neurocognitive and computational modeling of multi-speaker scenes (Ki beszél? Az egyszerre beszélők hangjának szétválasztása)

A pályázati támogatás mértéke: 332.000 E Ft, (2012: 34.000 E Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: Megalkották a hallási láncra-bomlás prediktív proto tárgyrepresentációkra épülő komputációs modelljét.

A pályázati téma megnevezése: Vizuális emlékezet és automatikus működés: szabályosságok megsértésének detekciója a látásban; OTKA (104462)

A pályázati támogatás mértéke: 14.904 E Ft (2012: 0 Ft). A pályázat 2013-ban kezdődik.

A pályázati téma megnevezése: Attention and distraction in hearing (Figyelem és elterelődés a hallási modalításban); OTKA (104635)

A pályázati támogatás mértéke: 21.971 E Ft (2012: 1.791 E Ft)

A pályázat megnevezése: Nemzeti Fejlesztési Minisztérium / Magyar Űrkutatási Iroda (URKUT_09-1-2009-0040)

A pályázati téma megnevezése: Extrém környezeti tényezők hatása a viselkedésszabályozásra

A pályázati támogatás mértéke: 3.090 E Ft (2012: 2.000 E Ft)

A pályázati téma megnevezése: Öregedés a versengő társadalomban: a kockázatvállalást kísérő pszichofiziológiai folyamatok; OTKA (K 104332)

A pályázati támogatás mértéke: 31.746 E Ft (2012: 0 Ft)

A pályázat, ill. az azzal kapcsolatos munka 2013. febr. 1-jén kezdődik meg.

A pályázati téma megnevezése: Kulcsingerek és szabályok: A szavak akusztikus és vizuális feldolgozásának neurokognitív vizsgálata; OTKA NK (101087)

A pályázati támogatás mértéke: 66.983 E Ft (2012: 14.425 E Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Az anyanyelv idegen nyelvű hangsúlymintázat elsajátítására gyakorolt hatását vizsgáló kísérlet kimutatta, hogy az idegen nyelvű hangsúly szekvencia tanulásban mutatott teljesítmény alacsony volt a fonéma szekvencia tanulásban mutatott teljesítménynél, akkor is ha a résztvevők több éve tanulták az adott nyelvet. Ez azt mutatja, hogy a magyar beszélők specifikus deficitet mutatnak az idegen nyelvű hangsúlymintázatok feldolgozásában. Egy EKP kísérletben, amelyben csecsemők preattentív hangsúly feldolgozási teljesítményét vizsgálták azt találták, hogy a 6 hónapos csecsemők hangsúlymintázattal kapcsolatos érzékenysége a kiugró akusztikus jellemzőkön alapul, míg a 10 hónapos csecsemők már érzékenyek az anyanyelvük absztrakt hangsúly mintázataira. Továbbá egy új viselkedéses és elektrofiziológiai paradigma kifejlesztésére került sor, amely a különböző szóalakok (szavak, álszavak, számsorok, álbetű sorok) automatikus feldolgozását vizsgálta. A kísérlet eredményei azt mutatták, hogy a korai EKP komponensek különböztek az egyes szóalakok esetén, és a manipuláció hatása (pl. szavak betűinek kicserélése vagy felcserélése) szintén kimutatható volt a komponensekben.

A pályázati téma megnevezése: A kutya és ember társas ingerekre való érzékenységének neurohormonális aspektusai: az oxytocin szerepe; OTKA (K-100695)

A pályázati támogatás mértéke: 20.120 E Ft, (2012: 6.094 E Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Kimutatásra került, hogy az orrspray formájában alkalmazott oxytocin hormonkezelés és a szociális ingerekkel történő előszenzitizálás hasonló módon hat az arc érzélem felismerésére valamint az érzelmi információk későbbi előhívására (erről kézirat benyújtva a Hormones and Behavior folyóirathoz). Kísérletes adatok igazolják azt is, hogy a kutyák esetében az oxytocinnal való kezelés illetve a szociális ingerekkel való előkondicionálás hasonló módon befolyásolja a társas helyzetekben való együttműködési készségüket, és ez a jelenség nagymértékben hasonló az oxytocin humán vizsgálatokban kimutatott szociális viselkedést befolyásoló hatásához (az eredményekből kézirat előkészítés alatt). Folyik továbbá az oxytocin receptor genotipizálásához szükséges DNS mintavétel valamint a kutyák viselkedéses teszt sorozatban való lemérése (eddig N=70 kutya). Ezzel párhuzamosan 12–18 hónapos csecsemők bevonásával a társas viselkedési készségeket felmérő tesztek pilóta vizsgálatai is megkezdődtek.

A pályázat megnevezése: 2012 évi MTA infrastruktúra pályázat (IF-17/2012)

A pályázati támogatás mértéke: 15.000.000 Ft (együtt az Összehasonlító Viselkedéskutató Csoporttal) (1) egy szemmozgás-követő berendezés, valamint (2) a videolabor fejlesztését szolgáló digitális kamera és keverőpult berendezés beszerzésére

Nemzetközi pályázatok

A pályázat megnevezése: Ösztönzés az Európai Unió 7. Kutatási-, technológiafejlesztési és demonstrációs keretprogramjában (FP7) és egyéb közös EU-s kezdeményezésekben való magyar részvétel támogatására (EU_KP_12)

A pályázati téma megnevezése: Brainquest pályázat magyar részvétel támogatás

A pályázati támogatás mértéke: 2 555 024 Ft, (2012: 0 Ft)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Az elektronikus mélység szabályozás elvén alapuló agyi elektródával megvalósult az idegsejt aktivitás nagy idői és téri felbontással történő monitorozása. Az elektródával mért adatok alapján történt a különböző agykérgi és talamikus területek idegsejt-tüzeléseinek jellemzése a lassú hullámú alvás során. Az elvégzett kísérletek igazolták, hogy az elektronikus mélység szabályozás elvén alapuló agyi elektróda akut és krónikus változata is alkalmas jó minőségű agyi elektromos jelek rögzítésére.

A pályázat megnevezése: COST (is1205) (kutatók együttműködését támogatja)

A pályázati téma megnevezése: Történetek szerepe a történelmi eseményekre vonatkozó szociális reprezentációk alakításában

A pályázati támogatás mértéke: 35.000 EUR, (2012: 5.000 EUR)

A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei: A kutatócsoportok megalakítása (a pályázat november közepén indult)

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Winkler I, Denham S, Mill R, Bohm TM, Bendixen A: Multistability in auditory stream segregation: a predictive coding view. Philosophical Transactions Royal Society of London Biological Sciences, 367(1591): 1001-1012 (2012)
2. Sulykos I, Czigler I: One plus one is less than two: Visual features elicit non-additive brain activity. Brain Research, 1398: 64-71 (2012)

3. Horváth J, Maess B, Baess P, Tóth A: Action-sound coincidences suppress evoked responses of the human auditory cortex in EEG and MEG. *Journal of Cognitive Neuroscience*, 24(9): 1919-1931 (2012)
4. Tóth B, Boha R, Pósfai M, Gaál ZsA, Kónya A, Stam CJ, Molnár M: EEG synchronization characteristics of functional connectivity and complex network properties of memory maintenance in the delta and theta frequency bands. *International Journal of Psychophysiology*, 83(3): 399-402 (2012)
5. Somogyvári Z, Cserpán D, Ulbert I, Érdi P: Localization of single-cell current sources based on extracellular potential patterns: The spike CSD method. *European Journal of Neuroscience*, 36: 3299-3313 (2012)
6. Téglás E, Gergely A, Kupán K, Miklósi Á, Topál J: Dog's gaze following is tuned to human communicative signals. *Current Biology*, 22(3): 209-222 (2012)
7. Miklósi Á, Topál J: The evolution of canine cognition. In: J Vonk; T Shackelford (szerk.) *The Oxford Handbook of Comparative Evolutionary Psychology*. Oxford; New York: Oxford University Press, 2012 pp. 513-568.
8. Gushin V, Shved D, Vinokhodova A, Vasylieva G, Nitchiporuk I, Ehmann B, Balázs L: Some psychophysiological and behavioral aspects of adaptation to simulated autonomous Mission to Mars. *Acta Astronautica*, 70: 52-57 (2012)
9. Liu J, Paez D, Laszló J, Fülöp M, Suwa K: Cross-cultural dimensions of meaning in the evaluation of events in world history?: Perceptions of historical calamities and progress in cross-cultural data from 30 societies. *Journal of Cross-Cultural Psychology*, 43(2): 251-272 (2012)
10. Becker M, Vignoles VL, Owe E, Brown R, Smith PB, Easterbrook, et al. Fulop M, et al.: Culture and the distinctiveness motive: Constructing identity in individualistic and collectivistic contexts. *Journal of Personality and Social Psychology*, 102(4): 833–855 (2012)
11. Kóbor A, Takács Á, Urbán R, Csépe V: The latent classes of subclinical ADHD symptoms: Convergences of multiple informant reports. *Research in Developmental Disabilities*, 33(5):1677-1689 (2012)
12. Erős F: Some social and political issues related to Ferenczi and the Hungarian school. In: Szekacs-Weisz Judit, Keve, Tom (szerk.) *Ferenczi and his world: rekindling the spirit of the Budapest school*, London: Karnac Books, 2012. pp. 39-54. (The history of psychoanalysis series)

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
MOLEKULÁRIS FARMAKOLÓGIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.; 1525 Budapest, Pf. 17.
telefon: (1) 438 1167; fax: (1) 438 1143
e-mail: kardos.julianna@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az MTA TTK MFI egy új akadémiai kutatóhely, amely a korábbi MTA KK intézetek szakirányú kompetenciáinak összevonásával kezdte meg működését 2012-ben. Az MFI kutatói összlétszámához viszonyítva a minősített kutatók aránya 2012-ben több mint 0,7 (11 MTA doktora, 35 PhD), a témavezető kutatók aránya 0,16, a Doktori Iskolákba beiratkozott PhD-hallgatók aránya 0,24. Az MFI fejlesztési koncepciója az alábbi tevékenységekre összpontosult: a) az új Centrum multidiszciplináris együttműködési képességének feltárása, kapcsolódó bázis-kapacitások és támogató struktúrák létrehozása; b) a nemzetközileg kiemelkedő színvonal fokozása és a biotechnológiai alkalmazások támogatása a molekuláris farmakológiai, sejtbiológiai, nanobiológiai és spektroszkópiái alap és alkalmazott kutatások területén; c) a hazai és nemzetközi kutatási pályázatokban nyertes kiemelkedő fiatal kutatók vezetői megbízása; d) a graduális és posztgraduális kutató-képzés elősegítése az ELTE, a BME és a SOTE együttműködésével. Az MFI fejlesztési koncepció megvalósítása érdekében a témavezető kutatók bevonásával teljesítmény-követelményi rendszer került kidolgozásra, amely szorgalmazta az idézettséget növelő publikációkat, az MFI és TTK kooperációban született cikkeket továbbá a pályázati források megszerzését, és kapcsolódóan az infrastruktúra fejlesztését.

Megalakulásakor az MFI szakirányú kompetenciái az alábbiak voltak: idegi patomechanizmusok, gyógyszertervezés és hatásvizsgálat; transzporterek és receptorok; őssejtbiológiai kutatások; gyógyszer és nanotoxicitás; metabolikus gyógyszer interakció és individuális terápia; nanorendszerek előállítása, szerkezete és medicinális alkalmazása; fluoreszcencia kölcsönhatások és képalkotás; bioMS. A kutatóhelyen és a kutatócentrumon belüli technológiai platformok megalapozása és kutatási együttműködések fejlesztése érdekében az MFI-ben az alábbi tevékenységek folytak: i) pilot kísérletek fluoreszcens fehérjét szövetspecifikusan kifejező transzgén patkány előállítására (Funkcionális Farmakológiai osztály laboratóriumai); ii) pilot kísérletek indukált pluripotens őssejt alapú idegi vizsgálati modellek létrehozására (Funkcionális Farmakológiai osztály laboratóriumai); iii) membránfehérje funkció követésére alkalmas nanoszenzor prototípus fejlesztés (Biológiai Nanokémiai, Kémiai és Funkcionális Farmakológiai osztályok); iv) optofiziológia technológiai platform megalapozása és közös ERC Synergy pályázat benyújtása (MFI Kémiai és Funkcionális Farmakológiai, Biológiai Nanokémia és Spektroszkópiái osztályok, továbbá KPI, MFA); v) a nanotoxicitás vizsgálati platformjának szerkezeti, kémiai valamint *in vitro* és *in vivo* biológiai megalapozása (MFI Kémiai és Funkcionális Farmakológiai, valamint Biológiai Nanokémia osztályok továbbá AKI, KPI, MFA, SzKI).

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Biokémiai farmakológiai kutatások

Nagy affinitású specifikus kölcsönhatást mutattak ki néhány szintetikus β -karbolin származék (Servier Kutatóintézet Zrt., potenciális MAO és kinázgátló gyógyszerjelöltek) HSA és AGP

szérumfehérje kötődésére. Elvégezték a humán szérum albumin egy új gyógyszerkötő régiójának azonosítását és részletes vizsgálatát. Egy erre alkalmas CD-spektroszkópiás jelzővegyülettel (biliverdin) feltérképezték az új kötőhely jellegzetes ligandumait. Kimutatták és részletesen jellemezték az új és a már ismert kötőhelyek közötti allostérikus kölcsönhatásokat. CD-spektroszkópiás mérésekkel igazolták réz- és cink ionok kötődését humán amyloid prekursor fehérjéből származó peptidekhez. Savas karakterű hatóanyagok (véralvadásgátlók, peszticidek, nem-szteroid gyulladáscsökkentők) sztereoszelektív elválasztását oldották meg és komplexképződését jellemezték új fejlesztésű (Cyclolab Kft.), bázikus sajátságú ciklodextrin szelektorokkal. Endomorfín analóg tetrapeptid diasztereomerek optikai tisztaságának vizsgálatára sztereoszelektív kapilláris elektroforézis analitikai módszert dolgoztak ki. A véralvadásgátló warfarin permetilált-monoamino- β -ciklodextrinnel alkotott komplexének stabilitását és szerkezetét határozták meg kapilláris elektroforézisben sztereoszelektív vizsgálatokkal

Megkezdtek a CYPtestTM diagnosztikai eljárás validálását és klinikai kipróbálását. A CYPtestTM a szervezet gyógyszer-lebontó képességének meghatározásával lehetővé teszi az egyénre szabott gyógyszeres terápia kialakítását. A diagnosztikai rendszer egyfelől a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő citokróm P450 enzimek expressziójának meghatározásán (CYP-fenotipizálás), másfelől a DNS analízissel megállapítható génhibák kimutatásán (CYP-genotipizálás) alapul. A CYPtestTM nemzetközi szabadalmi bejelentése megtörtént (PCT/IB2012/055299).

Funkcionális farmakológiai kutatások

Feltárták egy új típusú, korábban általuk leírt, glutaminsav felvétellel közvetlenül kiváltható gliális γ -amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamat forrását és *in vitro* epilepszia modellben felderítették hatását a neuronális és gliális aktivitásra. Az ERA Chemistry projekt keretében új gyógyszerjelölt vegyületeket fejlesztettek ezen neuroprotektív mechanizmus gyógyászati célú kiaknázására. A NANOSEN9 projekt támogatásával egyedi ionsatornák aktivitásának mérésére alkalmas nanoszenzort fejlesztettek ki, melyet a Richter Gyógyszergyár is támogatott, valamint vizsgálati protokollt dolgoztak ki nanorészecskék funkcionális neurotoxicitásának meghatározására. Feltérképezték a jelölésmentes agyi aktivitás térképezést lehetővé tevő Intrinsic Optical Signal létrejöttében szerepet játszó neuronális és gliális mechanizmusokat. Kalcium-szenzitív fehérjét expresszáló új patkány állatmodellt hoztak létre és karakterizáltak. Elvégezték idegsejtek differenciáltotott humán indukált pluripotens sejtek elektrofiziológiai karakterizációját, melyek alkalmasak lehetnek egyén-specifikus terápiás stratégiák megvalósítására.

Beállították frissen izolált a humán és patkány májsejt kultúra felhasználásával egy *in vitro* májmodellt, amelyben tesztelhető gyógyszer hatóanyagok uptake mechanizmusa, az uptake folyamatokban résztvevő transzporterek aránya, valamint az uptake folyamán előforduló interakciók más exogén és endogén vegyületekkel. A módszer alkalmas a fajok közötti uptake folyamatok különbségének, és az ebből adódó ADMETox tulajdonságok faji eltérésének tisztázására. A francia Biopredic biotechnológiai céggel történő együttműködés keretében igazolták, hogy a HepaRG humán hepatocarcinoma sejtvonala a többi sejtvonallal képest lényegesen jobb uptake expressziót mutat, és ezzel a sejtvonallal sikeres funkcionális vizsgálatokat és gyógyszer interakciót mértek. Igazolták, hogy kolesztatikus gyógyszerek hatására a HepaRG sejteken mért uptake gátlás a patkány hepatocitákkal mértnél jobban korrelál a humán hepatocitákkal, ezért helyettesíthetőek ezeknél a vizsgálatoknál. Kezdeti kísérletek indultak hepatocita Kupffer sejt ko-kultúra kialakításához. Sikeresen preparáltak jó életképességű Kupffer sejteket, és a kezdeti eredmények ígéretesek a két sejtípus együttes közös kultúrában tartásához. Kutatásokat végeznek a peptidomimetikumok előállítására és a

sztereoindukció vizsgálatára vonatkozóan Ugi-reakciókban királis karbonil vegyületek, királis aminok és királis izonitrilek használatával.

2011 decemberében a Biomembrán Laboratórium több munkatársa csatlakozott a TTK Molekuláris Farmakológiai Intézetéhez. A munkatársak több OTKA-pályázatát az MFI fogadta be, így a pályázatok résztvevőit is itt alkalmazták. A pályázatok három fő kutatási iránya a daganatok gyógyszerrezisztenciáját okozó membrán transzporterek, az aktív kalcium transzporterek, és a a prion típusú membránfehérjék vizsgálata volt. Ugyancsak az MFI alkalmazásába kerültek a humán embrionális őssejtekkel foglalkozó laboratórium és a molekuláris biológiai vizsgálatokat végző laboratórium munkatársai. Az egymással szoros kapcsolatban álló munkacsoportok számos közleménye jelent meg nemzetközi folyóiratokban. A legfontosabb eredmények közül a következők emelhetők ki: Az ABC multidrog transzporterek vizsgálatához olyan sejt vonalakat állítottak elő, amelyek a tumor őssejtekhez hasonlóan magas ABCG2 és ABCB1 expressziót mutatnak, ezeken olyan új daganatellenes szereket vizsgáltak, amelyeknek transzporter kölcsönhatásai jelentősen módosíthatják klinikai hatásukat. Evvel kapcsolatban olyan új diagnosztikai eljárást fejlesztettek ki, amely alkalmas a drog kölcsönhatások gyors, nagykapacitású vizsgálatára. Kidolgozták az ABCG2 hatékony tisztítási és rekonstrukciós módszerét. Új, stabilan integrált kalcium indikátor fehérjéket alkalmaztak az aktív kalcium transzporterek és a sejtek kalcium jeleinek vizsgálatához. Részletesen elemezték az őssejtek és a differenciálódó sejtek kalcium háztartását és a ligand-indukált kalcium jeleket. Új expressziós rendszereket, transzpozon-alapú stabil integrációs módszereket fejlesztettek a membrán transzporterek, a prion-fehérjék és a fluoreszcens indikátor fehérjék kifejezéséhez tumorsejtekben, specifikus normál sejtekben és humán embrionális őssejtekben. A módszerek alkalmazásával új módszert vezettek be humán indukált pluripotens őssejtek létrehozására. A laboratórium új témájaként az RNS interferencia folyamatába tartozó mikroRNS biogenezis egyik alternatív útvonalát, a mirtron útvonalat emlős sejtekben részletesen jellemezték. Kiemelendő, hogy a nagy nemzetközi versenyben elfogadott tudományos munkát a rangos szakfolyóirat (RNA Biology) olyan érdekesnek találta, hogy a mirtron útvonalról készített ábrát a 2012. szeptemberi szám címlapján szerepeltették.

A Molekuláris Sejtbiológiai Laboratórium 2012-ben alakult meg az MTA Lendület Program támogatásával és jelentős intézeti támogatással. Kimutatták a lipid anyagcserében fontos szerepet játszó ABCG1, illetve ABCG4 fehérjék funkcionális kölcsönhatását különböző szterollokkal, és megkezdték a kölcsönható régiók feltérképezését. Ezekből az eredményekből egy kézirat is elkészült. Egy széleskörű nemzetközi együttműködés keretében feltárták a sejtek energiaháztartását szabályozó LKB1/AMPK kinázok szerepét a máj legfontosabb epe-transzporterének, az ABCB11 sejt felszíni megjelenésének szabályozásában. Sikerült rávilágítaniuk egy alternatív szabályozó (PKA-függő) útvonal létezésére és szerepére is. Az eredmények nemzetközi ismertetése érdekében közleményt nyújtottak be.

Biológiai nanokémiai kutatások

Lipid membrán PAMAM dendrimer nanohordozó hatására bekövetkező szerkezeti tulajdonságainak változását figyelték meg kisszögű röntgenszórás és fagyasztva törés EM spektroszkópia kombinációjával.

Szövetbarát, nem toxikus polialmasav biomembránokra kifejtett hatását tanulmányozták multilamellás vezikulákban. Gyógyszermolekulák bevitelére szolgáló, sztérikusan stabilizált vezikulák esetében használt polietilén-glikol tartalmú lipidek helyett, polialmasavat alkalmaztak és az előállított unilamellás vezikulákat fizikai-kémiai módszerekkel széleskörűen jellemezték.

Az élő szervezetben lejátszódó létfontosságú folyamatok mechanizmusának megismerése céljából pirokatechin oxidáz, fenoxazinon szintetáz, szuperoxid dizmutáz és kataláz enzimek funkcionális modellezését végezték el mangán, vas és nikkel dioximátó komplex származékokkal.

Biológiai rendszerekben, képkalkotási célra hasznosítható módosított felületű nanoméretű szilikarészecskéket és fluoreszcens tulajdonságú, nagyfokú biokompatibilással rendelkező arany komplexeket állítottak elő.

Összetett nanorendszerek kisszögű röntgenszórásos vizsgálatára alkalmas eszközt és a mérési eredmények feldolgozásához szükséges számítógépes programot fejlesztettek.

Spektroszkópiai kutatások

Többféle aranykomplex szerkezetét és optikai tulajdonságait tanulmányozták. Az aranykomplexek oldatbeli tulajdonságainak leírásához új arany-oldószer molekuláris dinamikai párpotenciált dolgoztak ki, amely lehetővé teszi a vizsgálható szupramolekulák körének bővítését az önszerveződő fémkomplexek körében. Az SZKI Szupramolekuláris Laboratóriumban előállított arany és ón komplexek mechanolumineszcens tulajdonságát mutatták ki. Fluoreszcens arany klaszterek képződését figyelték meg fehérjékben és feltárták, hogy a fehérjeszerkezet mely részlete szükséges a klaszterképződéshez. PAMAM dendrimerek és modellmembránok kölcsönhatásait tanulmányozták összefrekvencia-keltési spektroszkópiával. Megállapították, hogy a dendrimerek a foszfolipid kettősréteg rendezettségét és töltéseloszlását is megváltoztatják.

A fényelnyelés hatására színváltozást mutató anyagok szupramolekulás komplexeinek tanulmányozása során, kukurbit[7]uril üregébe ékelődéssel sikerült szelektíven befolyásolni protonált merocianin és spiropirán izomerek közötti fotokémiai átalakulás kinetikáját. A ftálimidszármazékok molekulászerkezete és fényelnyelési reakcióik sebessége közötti kapcsolat feltárásával elősegítették a fotoredukció hatásfokának javítását.

Tioszermikarbazon rézkomplexek oldategyensúlyi tulajdonságait vizsgálták ESR spektroszkópiával, mivel újabban hatásosnak bizonyultak több humán rákos sejtvonalon is. ELTE kooperáció keretében megkezdték több biológiai eredetű minta és gyógyszerkészítmény ESR-vizsgálatát. A SOTE Orvosi Biokémiai Intézetének és a Department of Pharmacology, College of Medicine, The Ohio State University munkatársaival együttműködve reaktív N,O,C centrált gyökök spincsapdázási lehetőségeit tanulmányozták különböző csapdák esetén biológiai illetve modellrendszerekben. Az eredményekből eddig egy publikáció született.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet számos tudománynépszerűsítő fórumon számolt be kutatási tevékenységéről és eredményeiről.

A biokémiai farmakológiai kutatásokról a Természet Világa tudományos ismeretterjesztő folyóiratban, valamint az MTA-OTKA és az MTA TTK honlapokon adtak tájékoztatást.

A metabolikus gyógyszer-kölcsönhatások laboratórium tájékoztatta az érdeklődőket a CYPtestTM vizsgálat alapján kialakítható személyre szabott gyógyszeres terápia lehetőségeiről, amely biztosítja az ésszerű, kevesebb nem kívánt hatással és csökkent gyógyszerfogyasztással járó terápia kialakítását. Bemutatták a személyre szabott terápia és a betegek gyógyszer-lebontóképességéhez igazított terápiás stratégia lehetőségeit, amely hatékonyabb, kevesebb mellékhatással járó gyógyszeres kezeléshez vezet, és végül is egy

költségtakarékos, rövidebb kórházi kezelést igénylő ellátást és a betegek életminőségének javulását eredményezi. A tájékoztatás napi és hetilapokban, rádió és TV műsorokban, valamint laboratórium bemutató keretében történt.

Az MTA Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozat keretében „Megfejthető-e az agy kapcsolási térképe?” címmel laborbemutatóval egybekötött előadást szerveztek, melyet az MTA kiemelt programként mutatott be. Az előadás anyagát több médium is sugározta (Kossuth Rádió, d1 TV). Részt vettek több, laikusoknak szervezett ismeretterjesztő előadáson (pl. Budapest Science Meetup). A Kémiai Panoráma című, középiskolásokat megcélzó folyóirat munkájában szerzőként, valamint rovatvezetőként vettek részt.

A Biomembrán Laboratórium vezetője több interjút adott kutatásairól, illetve a kapcsolatos kutatások legújabb nemzetközi trendjeiről (MTA honlap, Kossuth Rádió, Klubrádió). A Laboratórium munkatársai bemutatót tartottak a Kutatók Éjszakája rendezvényen és az MTÜ Tárt Kapuk rendezvényen, ahol különösen a pluripotens őssejtek és a differenciálódott leánysejtek, a daganatkutatási eredmények, valamint a molekuláris genetikai vizsgálatok keltettek széleskörű érdeklődést.

A Tér-idő című rádióműsorban interjú hangzott el a Molekuláris Sejtbiológiai Laboratórium vezetőjének kutatásairól. A Kutatók éjszakája, valamint a Magyar Tudomány Ünnepe Tárt Kapu rendezvényeken az érdeklődő közönség megismerhette a kutatócsoport tevékenységét.

A Biológiai nanokémiai osztály kutatói az érdeklődő, szakosodás előtt álló egyetemi hallgatóknak, intézeti látogatáson résztvevő egyetemi hallgatóknak, valamint középiskolásoknak tartottak demonstrációs előadásokat és laboratóriumi eszközbemutatót. A biomembránok összetett tulajdonságának megismerését nyújtó vezikulás rendszerekről ismeretterjesztő cikket írtak a Kémiai Panoráma népszerűsítő folyóiratba. Ismeretterjesztő előadást tartottak a Budapest Science Meetup fórum keretében.

A Spektroszkópiai osztály témavezetőként részt vett az MTA TTK „AKI kíváncsi kémikus” kutatótábor rendezvényen.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Az MFI számos hazai (MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, MTA Szegedi Biológiai Központ; BME, ELTE, SZTE, DTE, SOTE, Szent István Egyetem, Heim Pál Gyermekkórház, Országos Onkológiai Intézet; Richter Gedeon Nyrt., CycloLab, Creative Labor Kft., KPS Kft., LuminoChem Kft., Nanochem Kft., Vichem Kft) és nemzetközi (így pl. a Catholic Univ. Louvain, (B); CNRS, Paris (F); ESRF, Grenoble (F); Inst. Natn. Santé et Rech. Médicale, Montpellier (F); Max von Laue-Paul Langevin Inst., Grenoble (F); Natn. Inst. Nuclear Physics, (I); Palacky Univ., (CZ); Ruhr Univ. Bochum (D); Univ. Provence, Marseille (F); Univ. Louis Pasteur de Strasbourg (F); Univ. Antwerpen (B); Univ. Copenhagen (D); Univ. Kuopio (FI); Univ. Ljubljana (SL); Univ. North Carolina, Chapel Hill, NC (USA); Univ. Rennes (F); Univ. Turku (FI); Yantai Univ., Yantai (CH)) kapcsolattal rendelkezik.

Hazai kapcsolatok

Az „Endomorfín analóg tetrapeptidek sztereoszelektív elválasztása kapilláris elektroforézissel” című téma keretében az intézet a Szegedi Tudományegyetem, MTA Szegedi Biológiai Központjával kutatási együttműködést alakított ki. A kooperáció során az endomorfín analóg tetrapeptid diasztereomerek optikai tisztaságának vizsgálatára sztereoszelektív kapilláris elektroforézis analitikai módszert dolgoztak ki. A közös munka eredményéről publikációt jelentettek meg.

A Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpóziumot a Magyar Kísérletes és Klinikai Farmakológiai Társasággal együttműködve rendezték. A szimpózium, amely 2012. április 18–20. között került megrendezésre Galyatetőn, teret adott a klasszikus farmakokinetikai és metabolizmus vizsgálatokon túl az *in silico* farmakokinetikai becslésekkel, a transzporter fehérjékkel, az igazságügyi-klinikai vizsgálatokkal, a hatósági irányelvek változásaival, valamint az új analitikai és biotechnológia megoldásokkal kapcsolatos problémák megvitatásának. A szimpózium eredményeit konferencia kiadványban megjelentették.

A „Személyre szabott gyógyszeres terápia kialakítása a beteg gyógyszer-lebontó képessége alapján” témában klinikákkal és kórházakkal (Fővárosi Önkormányzat Egyesített Szent István és Szent László Kórház Budapest, Gottsegen György Országos Kardiológiai Intézet Budapest, a Semmelweis Egyetem, Transzplantációs és Sebészeti Klinika Budapest, Semmelweis Egyetem Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika Budapest, Heim Pál Kórház, Madarász Utcai Gyermekkórház Budapest, Fejér Megyei Szent György Kórház Székesfehérvár) működtek együtt. Ennek keretében a CYPtestTM alkalmazásával vizsgálják a betegek gyógyszer-lebontó- (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a betegek egyéni gyógyszeres terápiáját. A közös munka eredményeit egy tudományos közleményben és számos előadásban, konferencia keretében ismertették.

Az intézet „Egy új szolgáltatás, a CYPtest továbbfejlesztése és piaci bevezetése a személyre szabott gyógyszeres terápia kialakításában” című témában a Toxi-Coop Zrt. partnerrel együtt végeztek kutatásfejlesztési tevékenységet. A „Szakértői program a gyógyszer-lebontás és kiürítés becslésére” című témában is eredményesen kooperált az intézet a Toxi-Coop Zrt. kutatóival. A rendelkezésre álló irodalmi adatok alapján feltérképezték ismert gyógyszerek *in vitro* farmakokinetikai és metabolikus sajátosságait, intrinsic clearance értékét, metabolizmusának sebességét, a metabolizmus során képződött termékek szerkezetét, valamint az egyes metabolitok képződésében szerepet játszó CYP enzimeket.

A DNS metilációjának meghatározását az intézet az Enzimológiai Intézet kutatócsoportjával végezte. A korábban kidolgozott LC/MS/MS alapú metilációs profil meghatározást alkalmazták számos biológiai mintán. Kutatási eredményeiket egy publikációban közzétették.

A konnektóm térképezési módszerek kidolgozása érdekében az intézet kutatási szerződést kötött a Richter Gedeon Nyrt. céggel. A „Nanosentry alapú konnektóm térképezés” című szerződés keretében immunhisztokémiai jelölési módszert dolgoztak ki, melynek révén a saját fejlesztésű nanoszenzorok fiziológias aktivitást mutató akut agyszövetben is célba juttathatók.

A „Komplex sejtkultúra- és membránvezikula-alapú *in vitro* szolgáltatáscsomag fejlesztés koleszterikus anyagok nagy érzékenységű preklinikai szűrésére” című pályázat keretében a Solvo Biotechnology kutatócsoportjával együttműködve a kutatók a hepatobiliáris uptake és efflux transzporterek expressziójának változását határozták meg a kultúra idejének függvényében. A gyógyszer-interakciók vizsgálatára alkalmas tesztek dolgoztak ki humán és patkány hepatociták felhasználásával. A témában egy publikáció jelent meg.

Az intézet közös projektet indított el az Immunogene Kft. közreműködésével. Ezt követően, közös KMR12 pályázatot nyújtott be „Kalcium érzékelő fehérjét szövetspecifikusan kifejező transzgenikus patkányok létrehozása *in vivo* gyógyszervizsgálatok céljára” című kutatási projekt megvalósítása érdekében. Együttműködő partnerintézmények az MTA Kémiai Technológia Transzfer Kft., az MTA TKI és a Toxi-Coop Zrt. A projekt keretében kalcium-szenzitív fehérjét szövet-specifikusan expresszáló új patkány állatmodellt hoztak létre és karakterizáltak.

Az intézet Biomembrán és a Molekuláris Sejtbiológiai Laboratóriumai szoros együttműködésben állnak a Semmelweis Egyetemen Biofizikai és Sugárbiológiai Intézetével, és annak keretében működő Molekuláris Biofizika Kutatócsoporttal. A laboratórium tagjai rendszeresen részt vesznek az ELTE/TTK és a Semmelweis Egyetem posztgraduális képzésében – kurzusok tartásával (Membránbiológia kurzus), PhD-értekezések és egyetemi pályázatok bírálatával, bizottsági tagi részvétellel.

Az intézet Molekuláris Sejtbiológiai Laboratóriuma ipari együttműködést készített elő az indukált pluripotens őssejtek felhasználása témában, melyben partnere a Richter Gedeon Nyrt. Az együttműködéshez szükséges kísérlettervet és költségvetést kidolgozták.

Az „Önszerveződő lamelláris molekuláris szerkezetek struktúrája és dinamikai sajátosságai” című konzorcionális OTKA-pályázat keretében – az MTA Szegedi Biológiai Központtal és az MTA Wigner Fizikai Központtal együttműködve – a Biológiai Nanokémia Osztály a preparált modellmembrán (vezikuláris) rendszerek szerkezeti jellemzését az osztály röntgenszórásos berendezéseinek és a Wigner Fizikai Központ neutronszórásos berendezésének felhasználásával valósították meg. A témában egy publikáció jelent meg.

„A trombus mátrix proteolitikus lebontása: új célpontok és eszközök a trombolízis területén” című OTKA-pályázat keretében az intézet kooperáló partnere a Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémia Intézete volt. A kutatók a trombus kezelést biztosító gyógyszermolekula célba juttatását biztosító vezikulás rendszerek szerkezeti és morfológiai jellemzését végezték el. A szöveti környezetben lévő anyagok (fibrin, fehérjék) vezikulákkal történő kölcsönhatását tanulmányozták. DNS és hiszton tartalmú fibrin mátrixok (rögök) szerkezeti és reológiai sajátosságait jellemezték és azok közötti összefüggéseket tártak fel. Az eredményeikről egy publikációban számoltak be.

A „Minőségellenőrzési vizsgálatok elvégzése” című kutatásait az Izotóp Intézet Kft.-vel közösen végezte. A megrendelő részére minőségi analitikai célokra infravörös és Raman spektroszkópiai méréseket, és az azokhoz tartozó kiértékeléseket végzett.

A „Fertőzőes betegségek kezelésére szolgáló készítmények fagyasztatöréses vizsgálata” című témában az intézet együttműködő partnere a Richter Gedeon Nyrt. volt. Az intézet a megrendelő részére morfológiai jellemzést és a kolloidrendszer szerkezeti típusának feltárását biztosító kutatási munkát végzett.

Továbbá a „Hialuronsav és sóinak fiziko-kémiai jellemzése” című közös kutatási témában az intézet a röntgenszórással feltárható nanoszerkezeti, atomi kölcsönhatásokat feltáró spektroszkópiai, azokhoz értelmezését segítő modellszámításokat, NMR és morfológiai vizsgálatokat végzett. A minták molekulaméretének meghatározását és a komplex tulajdonságokkal bíró reológiai jellemzését is elvégezték. Eredményeikről egy előadás és egy tudományos poszter formájában adtak számot.

A „Kisszögű röntgenszórásos (SAXS) módszer kiépítése és működtetése” kutatási projekt keretében (Richter Gedeon Nyrt. kutatóival partnerségben) a hazai kutatóhelyeket tekintve egyedülálló, nemzetközi szempontból a legmagasabb technikai színvonalnak megfelelő kutatóeszköz első változatát tervezték és vásárolt alkatrészek felhasználásával építették fel.

A „DunaStyr vízminták vizsgálata” című kutatási témában a DunaStyr Zrt. technológiájában felhasznált víz kolloid tartalmának vizsgálatát és morfológiai jellemzését végezték el.

Az intézet a BME közös Lézerspektroszkópia Laboratóriuma a „Molekuláris szenzorok és kapcsolók” kutatási témában vizsgálatokat végeztek. Új abszorpciós és fluoreszcens anion-szenzorokat szintetizáltak, valamint elvégezték azok spektroszkópiai és fotokémiai jellemzését. Az egyik „podand-szerkezetű” vízoldható fluoreszcens szenzor, nukleozid

trifoszfátok kimutatásra alkalmasnak bizonyult, ezt a vegyületet intracelluláris folyamatok mikroszkópos követésére is kívánják vizsgálni. A témában egy közös publikáció jelent meg.

A „Katalizátorok szintézise és alkalmazása” című témában az intézet együttműködő partnere a BME volt. Spektroszkópiai mérések alapján jellemezték arilpirrol vegyületek szerkezetét, királis izomerjeinek stabilitását. Az ilyen vegyületek királis katalizátor-hatásuk miatt jelentősek. WO_3 nanorészecskék fotokatalitikus hatékonyságát vizsgálták a kristályszerkezet függvényében. Az eredményeikről két közös publikációban számoltak be.

Az intézet, továbbá az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont és az MTA Energiatudományi Kutatóközpont „Neutron diffrakciós módszerek és komplementer módszereinek fejlesztése” című kutatási projekt (Nap Veneus) keretében nemzetközi tudományos együttműködést folytatott. A neutron diffrakciós mérések elméleti optimalizálását végezték el: izotóphelyettesítéses folyadék diffrakciós kísérletek tervezéséhez kapcsolódóan. Eredményeiket egy közleményben prezentálták.

Nemzetközi kapcsolatok

A „Tropeinek szerkezet-hatás összefüggései nikotinos acetilkolin receptor modelleken” témában nemzetközi kutatási együttműködést építettek ki az University of California, San Diego (USA) kutatóival. Eredményeik a nikotinos receptor altípus-szelektivitás vizsgálatokhoz kapcsolódnak.

Együttműködési megállapodás formájában tanulmányozták szteroid típusú vegyületek homeosztázisa, valamint a gyógyszer-metabolizmus és szabályozás kapcsolatának *in vitro* kísérletes és matematikai modellezését a Ljubljana Egyetem, Orvosi Kar (Ljubljana, Szlovénia) munkatársaival. Két benyújtott tudományos cikk és egy meghívott plenáris előadás formájában ismertették az eredményeket.

A „GABA transzporter altípus specifikus vegyületek fejlesztése” című témában, az University of Leuven (Belgium) kutatóival sikeresen kollaboráltak. Az ERA Chemistry projekt címe: „Novel targets and new drug candidates to combat epilepsy: Design of subtype-selective spirocyclic inhibitors to distinguish among gamma-aminobutyric acid transporter protein subtypes.” A pályázat keretében új gyógyszerjelölt vegyületeket fejlesztettek a neuroprotektív Glu/GABA mechanizmus gyógyászati célú kiaknázására.

Az intézet szimpóziumot szervezett a XI. European Meeting on Glial Cells in Health and Disease (Berlin, Németország) nemzetközi konferencián, amelynek címe „Role of glial GABA transporters in controlling neurotransmission” volt. Az együttműködő partnerintézmények neve: University of Utah (USA), University of California, Los Angeles (USA) és University of Mainz (Németország).

A szerotonin szerepének megértése az axon-növekedés szabályozásában kutatási témában MTA mobilitási pályázatot nyújtott be az intézet. Kooperáló partnerek: Kyoto University (Japán) és az ELTE. A pályázat címe: „A szerotonin szerepe a gasztrulációs mozgások és az axon-növekedés szabályozásában”.

Az „Új típusú connectome térképezési módszerek kidolgozása” című kutatási téma megvalósítása érdekében konzorciumot hoztak létre és egy FET Open pályázatot nyújtottak be amelynek címe: „The dynamic connectome project: reverse-engineering the structure and information processing algorithms of neuronal networks”. Partnerintézetek az University of Newcastle (UK), Ruhr University, Bochum (Németország) és az MTA KOKI.

A „HepaRG, humán hepatoma sejtvonal uptake transzporter proteinjeinek jellemzése” című témában az intézet közös kutatásokat végez a francia Biopredic International (Rennes)

kutatócsoporttal. A HepaRG sejt vonal helyettesítheti a nagyon korlátozottan rendelkezésre álló humán primer hepatocitákat *in vitro* ADMETox vizsgálatokban. Igazolták, hogy az uptake transzporterek gyógyszer-interakciós vizsgálatai hasonló eredményre vezettek a két sejt típusban.

A Biomembrán laboratórium nemzetközi ACHILLES kutatási projekt keretében kutatási tevékenységet folytatott a daganatsejtek transzportereinek vizsgálatára vonatkozóan. Partnerintézetek az MTA Enzimológia Intézet, az Université de Lyon (Franciaország) és a Mayo Clinic (USA) volt.

A Biomembrán laboratórium „Az ABCG2 transzporter alkalmazása gyógyszer kölcsönhatások vizsgálatára” kutatási tevékenységet a Fluorosme Company, Worcester, Massachusetts (USA) partnerrel dolgozta ki.

Az „LKB1 szabályozó szerepe a sejtek polaritásában” című témában széleskörű nemzetközi együttműködés formájában végeztek kutatásokat. Együttműködő partnerintézmények: National Institute of Child Health and Human Development, NIH, Bethesda (USA), National Institute of Dental and Craniofacial Research, NIH, Bethesda (USA), Faculty of Pharmacy, The University of Sydney, NSW 2006, (Ausztrália), Laboratory of Molecular Cancer Biology, University of Namur, Bruxelles, (Belgium) és University of California, San Diego, La Jolla, CA (USA). Feltárták a sejtek energiaháztartását meghatározó LKB1/AMPK kinázok szabályozó szerepét a májsejtek polaritásában.

Az MTA–CNRS együttműködés lehetőséget biztosított az anyagtudományban és gyógyszerhatóanyag szállításban hasznosítható szupramolekuláris kölcsönhatások vizsgálatára. A partnerintézmény az Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (Thiais, Franciaország) volt. Feltárták az 1-alkil-3-metil-imidazólium típusú ionos folyadékok molekuláris szerkezetének hatását a 4-szulfonáto-kalix[8]arén makrociklushoz kötődés termodinamikájára. Megállapították, hogy szupramolekuláris komplex képződés elősegíti szerves anyagból felépülő nanorészecskék keletkezését.

A „Szemikarbazon és tioszemikarbazon származékok oldategyensúlyi vizsgálata” című pályázat keretében kutatásokat végeznek a Szegedi Tudományegyetemmel. A vizsgálatokban az osztrák University of Vienna munkatársai is részt vesznek. Az orvosi gyakorlatban számos rákellenes hatású fémkomplexet használnak, de ezek mellékhatásai és a gyakran kialakuló rezisztencia miatt szükséges ezek további vizsgálata és fejlesztése. A tioszemikarbazon vegyületek rézkomplexei újabban hatásosnak bizonyultak több humán rákos sejt vonalon is. A vegyületek oldatkémiai vizsgálata hozzásegíti a biológusokat-gyógyszerészeket ezen vegyületek gyógyszer-hatásmechanizmusának és *in vivo* alkalmazhatóságának felderítésében. A témában három közös publikációt jelentettek meg.

A „Cisz/transz-2-aminociklohexán-karbonsav származékok vizsgálata CW/pulzus ESR és DFT módszerekkel” című FWO (G.0468.03) és COST Action P15 együttműködésben az intézet a belgiumi University of Antwerpen kutatóival közösen végez vizsgálatokat. Megállapították, hogy a 2-aminociklohexán karbonsavak cisz/transz izomerjeinek komplexképző sajátsága réz(II)ionokkal eltérést mutat. A cisz izomerek stabilitása jelentősen nagyobb a transz izomerekéhez képest. Ennek vizsgálatát CW- és pulzus-ESR mérések, valamint kiegészítő DFT számítások segítségével végezték el. Az eredményekről egy közleményben adtak tájékoztatást.

Az. „Oxovanádium(IV)ionok kötődésének vizsgálata human serum albuminnal” témában Szegedi Tudományegyetemmel és Instituto Superior Técnico, Lisszabon (Portugália) végeztek kutatási tevékenységet. Az inzulin utánzó vanádium komplexek biotranszformációja vérben egy fontos vizsgálati cél a gyógyszerhatás növelése érdekében. A gyógyszer felszívódására,

transzportjára és metabolizmusára jelentős hatást gyakorolhatnak a plazmában előforduló nagy tömegszámú komponensek. A vanádium szállításában a human serum albumin szerepét mutatták ki, amely a legnagyobb affinitással köti meg a vanádium komplexeket. Ezért ennek a kötődésnek az oldategyensúlyi vizsgálatát végezték el különböző módszerekkel, melyek között az ESR-spektroszkópia a szerkezetvizsgálat szempontjából jelentős hozzájárulást adott. A témában egy publikációt jelentettek meg.

A „Biológiai releváns reaktív gyökök kimutatása” című kutatást a SOTE Orvosi Biokémiai Intézet, az Aix Marseille University, Institut de Chimie Radicalaire, valamint az The Ohio State University (USA) munkatársaival együttműködve végezték. A kooperáció keretében a biológiai releváns reaktív gyökök kimutatását elvégezték különböző spincsapdák segítségével biológiai, illetve modellrendszerekben, melyről egy közleményben számoltak be. Az itt szerzett ismeretek toxikológiában is alkalmazhatók.

A „Mágneses nanorészecskéket tartalmazó gyógyhatású készítmények és biológiai eredetű minták vizsgálata” címmel kutatásokat végeztek az Ural Federal University Kísérleti Fizika Tanszék és az ELTE Kémiai Intézet munkatársaival. Az ESR-spektroszkópia és a Mössbauer-spektroszkópia alkalmazásával biológiai eredetű minták, illetve gyógyszerkészítmények szerkezeti és mágneses tulajdonságait kutatják elsősorban azzal a céllal, hogy felderítsék a biológiai és spektroszkópiai módszerek segítségével kimutatható jellemzők között fennálló esetleges összefüggéseket, melyek hozzájárulhatnak egyes biológiai folyamatok alapjainak teljesebb megértéséhez. E témában két publikációt nyújtottak be.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az MFI 2012. évi bevétele mintegy 10 %-kal haladta meg a kiadásainak összegét miközben új, önerős nagyműszer beruházások jöttek létre (SAXS, *in vitro* kétfoton mikroszkópia). Az MFI várható MTA központi támogatása és a már megkötött szerződéses bevételei alapján az intézet 2013., 2014. és 2015. évi működését is sikerült biztosítani.

Az MTA Lendület Program (LP2012-25/2012) keretében az „ABC transzporterek sejten belüli mozgásának tanulmányozása polarizált sejtekben” című kutatásokat végzi az intézet Molekuláris Sejtbiológiai Laboratóriuma. A pályázati támogatás mértéke: 234 M Ft ebből a 2012. esztendőben kapott forrás 30 M Ft. A kutatócsoport elvégezte bizonyos ABC transzporterek (ABCG1 és izoformáinak, valamint ABCG4) kölcsönhatásának vizsgálatát, a kölcsönható régiók feltérképezését, továbbá feltárták az LKB1/AMPK kinázok szabályozó szerepét az ABCB11 epetranszporter sejt felszínén történő megjelenésében májsejtekben.

A Nemzeti Fejlesztési Ügynökség által a „Piacorientált kutatás-fejlesztési tevékenység támogatása a közép-magyarországi régióban, KMR_12” program keretében benyújtott és elnyert pályázat címe: „Kalcium érzékelő fehérjét szövet-specifikusan kifejező transzgenikus patkányok létrehozása *in vivo* gyógyszervizsgálatok céljára” („TransRat”, KMR_12-1-2012-0112). Az intézet pályázati támogatása: 128 M Ft, ebből a 2012. esztendőben kifizetett előleg: 64 M Ft. A kétéves pályázat során transzpozon-alapú génbeviteli eljárással kalciumszintet érzékelő fluoreszcens fehérjéket stabilan kifejező transzgenikus patkányokat hozott létre a Biomembrán laboratórium. Konstitutív, illetve szövetspecifikus promóterek alkalmazásával a létrehozott modellállatokban adott szövetek fiziológiás és gyógyszerhatástani vizsgálatára kerülhet sor. A későbbiek során lehetőség nyílik betegségmodelleket reprezentáló egyéb transzgenikus patkányokkal való keresztezés utódállataiban az adott szindróma kapcsán szövetspecifikus kalciumszintek monitorozására. A program partnerei az MTA Kémiai Technológia Transzfer Kft. és az Toxi-Coop Zrt.

A „Piacorientált kutatás-fejlesztési tevékenység támogatása a középmagyarországi régióban” című program (KMR 12-12012-0155) keretében 67 M Ft pályázati támogatást nyert az intézet a „PET nyomjelzési technológia kifejlesztése liposzóma alapú gyógyszertranszport *in vivo* tanulmányozására” című pályázatával. A munka 2013-ban kezdődik.

Az intézet a GOP-1.3.1.-11/B-2011-0042 sorszámú pályázat keretében, az „Egy új szolgáltatás, a CYPtest továbbfejlesztése és piaci bevezetése a személyre szabott gyógyszeres terápia kialakításában” című témában 53 M Ft támogatást nyert el 2012-ben. Ebben az esztendőben befejezték a CYPtestTM eljárás módszereinek (CYP-fenotipizálás és CYP-genotipizálás) validálását, valamint megkezdték a klinikai kipróbálást.

Az intézet a GOP-1.1.1-11-2012-0027 sorszámú pályázat keretében 49 M Ft pályázati támogatást nyert el 2012-ben. A „Szakértői program a gyógyszer-lebontás és kiürítés becslésére” című kutatás során 2012-ben feltérképezték ismert gyógyszerek *in vitro* farmakokinetikai és metabolikus sajátosságait, intrinsic clearance értékét, metabolizmusának sebességét, a metabolizmus során képződött termékek szerkezetét, valamint az egyes metabolitok képződésében szerepet játszó CYP enzimeket.

Az OTKA K 104459 sorszámú pályázat keretében az „Antipszichotikum kezelésben részesülő betegek személyre szabott terápiájának lehetőségei” című kutatási tevékenységhez 23 M Ft támogatásban részesült. LC-MS/MS módszert dolgoztak ki a szkizofréniában és bipoláris zavarban szenvedő betegek terápiájában leggyakrabban alkalmazott antipszichotikumok és metabolitjaik meghatározására. Vizsgálták a kiválasztott antipszichotikumok *in vitro* metabolizmusát humán máj mikroszómában és CYP enzim térképezést végeztek.

A KMOP-1.1.2-07/1-2008-0002 (4700158153) sorszámú pályázat témája a Nanosentry alapú connectome térképezés. A pályázati támogatás mértéke: 16 M Ft, melyből 2012-ben 8 M Ft. A munka eredménye nem hozható nyilvánosságra.

A 2012-ben elnyert OTKA (K 104201) sorszámú pályázat keretében „A fényelnyelést követő folyamatok változtatása biokompatibilis makrociklusokkal és elektrolitokkal” témában 2013-tól vizsgálatokat végeznek. A pályázati támogatás keretösszege 17 M Ft.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Az MFI kutatói 81 publikációt nyújtottak be nemzetközi referált folyóiratokhoz, ebből 62 már megjelent vagy in press.

1. Héja L, Nyitrai G, Kékesi O, Dobolyi A, Szabó P, Fiath R, Ulbert I, Pál-Szenthe B, Palkovits M, Kardos J: Astrocytes convert network excitation to tonic inhibition of neurons. BMC Biology, 10: 26 (2012)
2. Erdei Z, Sarkadi B, Brózik A, Szebényi K, Várady G, Makó V, Péntek A, Orbán TI, Apáti A: Dynamic ABCG2 expression in human embryonic stem cells provides the basis for stress response. Eur Biophys J, 2012 Aug 1. [Epub ahead of print] PMID: 22851001.
3. Telbisz A, Ozvegy-Laczka C, Hegedus T, Varadi A, Sarkadi B: Effects of the lipid environment, cholesterol and bile acids on the function of purified, reconstituted human ABCG2 protein. Biochem J, 2012 Dec 3. [Epub ahead of print], PMID: 23205634 (2012)
4. Nyitrai G, Kékesi O, Pál I, Keglevich P, Csíki Z, Fügedi P, Simon Á, Fitos I, Németh K, Visy J, Tárkányi G, Kardos J: Assessing toxicity of polyamidoamine dendrimers by neuronal signaling functions. Nanotoxicology, 6(6): 576-586 (2012)

5. Varga Z, Wacha A, Vainio U, Gummel J, Bóta A: Characterization of the PEG layer of sterically stabilized liposomes: a SAXS study. *Chemistry and Physics of Lipids*, 165(4): 387-392 (2012)
6. Fitos I, Simon Á, Zsila F, Mády G, Bencsura Á, Varga Z, Órfi L, Kéri G, Visy J: Characterization of binding mode of imatinib to human alpha(1)-acid glycoprotein. *International Journal of Biological Macromolecules*, 50(3): 788-795 (2012)
7. Jemnitz K, Veres Z, Szabó M, Baranyai Z, Jakab F, Vereczkey L: Differential inhibitory effect of cyclosporin A and bosentan on taurocholate uptake in human and rat hepatocytes as a function of culturing time. *Toxicol In Vitro*, 26:174–181 (2012)
8. Temesvári M, Kóbori L, Paulik J, Sárváry E, Belic A, Monostory K: Estimation of drug-metabolizing capacity by cytochrome P450 genotyping and expression. *Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics*, 341: 294-305 (2012)
9. Miskolczy Z, Biczók L, Jablonkai I: Comment on “Dual fluorescence of ellipticine: excited state proton transfer from solvent versus solvent mediated intramolecular proton transfer”. *Journal of Physical Chemistry A*, 116(2): 899-900 (2012)
10. Nagy NV, Van Doorslaer S, Szabó-Plánka T, Van Rompaey S, Hamza A, Fülöp F, Tóth GK, Rockenbauer A: Copper(II)-binding ability of stereoisomeric cis- and trans-2-aminocyclohexanecarboxylic acid-l-phenylalanine dipeptides. A combined CW/pulsed EPR and DFT study. *Inorganic Chemistry*, 51(3): 1386-1399 (2012)

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.

telefon: (1) 392 2225; fax: (1) 392 2226

e-mail: barsony.istvan@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az intézet meghatározott stratégia szerint, mint multidiszciplináris rendszerintegrátor folytatja a nanoméretű szerkezetek és architektúrák, funkcionális anyagok tulajdonságainak felfedező kutatását és az ismeretek kreatív alkalmazását integrált mikro- és nanorendszerekben. Az MFA eredményei, így a tudományometriai mutatókon túl a benyújtott szabadalmakban, PhD-képzési és egyéb oktatási támogatásban, a tudományos eredmények ipari hasznosításában, tanácsadásban komplex módon testesülnek meg.

A beszámolási időszak új szervezeti felállásban, az MTA TTK tagintézményeként, központosított gazdasági ügyintézővel és csökkentett, 122 fős engedélyezett intézeti létszámmal indult. Az átszervezés és a központi adminisztráció finanszírozása, valamint az elvonások következtében az intézetben kutatási célra (bérre és működésre) felhasználható költségvetési forrás a megelőző évi 522 M Ft-ról mindössze 377 M Ft-ra apadt, ami már a bérfedezetre sem volt elég. A beszámolási évben zárult, ill. elszámolt pályázatoknak köszönhetően az MFA végül mintegy 1,2 Mrd Ft-os forgalmat bonyolított, ami nagyjából a 2011-es szintnek felel meg.

Az 5000m²-nyi területen a KFKI Csillebércei kampuszon, azaz a TTK-tól tartósan elkülönülő telephelyen működő intézet számára a legnagyobb kiadást továbbra is a nagy kísérleti kutatási infrastruktúra működtetése, karbantartása és fejlesztése jelenti, egyébként ISO 9001:2008 minőségbiztosítási rendszerben. Ezek tiszta munkatereket és nagy analitikai laboratóriumokat jelentenek, melyek közül négy működik országos Stratégiai Kutatási Infrastruktúra besorolással, egyikük (Ellipszometriai laboratórium) Akkreditált Vizsgáló Laboratóriumként. A romló gazdálkodási körülmények az intézetet a kutatási szerkezet és a laborelhelyezések átgondolására készítették, amit katalizált a CERN@Wigner beruházás elhelyezése a kampuszon. A főépület hőszigetelési munkálatainak ettől független befejezése és a fentiek eredményeképp döntés született a vékonyréteg napelem-technológiai kutatások befejezéséről, a vonatkozó laborok felszabadításáról, az elektronmikroszkópia áthelyezéséről. Az MTA támogatás (30+34MFt) és a Wigner FKK által biztosított kompenzáció (50MFt) biztosította a szükséges szerkezetátalakítás fedezetét. Nyolc preparatív és mérőlaboratórium átszervezése, a Mikrotechnológiai Osztály tisztatér és mérőlabor-átalakításai, az elektronmikroszkópiai infrastruktúra és a Vékonyréteg Osztály teljes átköltöztetése a főépületbe óriási selejtezéssel együtt azt eredményezték, hogy a helyfoglalás mintegy 20%-kal csökkent. Eközben a laboratóriumok és a felújított 11 dolgozószoba színvonala jelentősen emelkedett. Mindenütt sikerült teljes elektromos korszerűsítést, légkondicionálást és zártkörű hűtést megvalósítani, ami további működési költségcsökkentést jelent majd. Bár a végleges elhelyezkedés még pár hónapot 2013-ban is igénybe vesz, már érezhető a munkakörülmények jelentős javulása. Erre annál nagyobb szükség volt, mivel az MFA a Q2 épület használatbavétele után is a jelenlegi telephelyen működik tovább az így csökkentett költségekkel.

Az MFA belső szervezeti felállása 2012-ben nem változott, bár nyugdíjazások, kilépések miatt módosult a műszaki-adminisztratív felelősök személye. Az intézet továbbra is változatlan szakmai vezetéssel, hat tudományos osztállyal működött.

2012-ben 5 EU FP7-es pályázatuk futott és az ENIAC 2. pályázati fordulóban nyertes pályázatuk (CAJAL4EU). Az év folyamán egy új PhD-fokozat született, és 33 PhD-kutatás témavezetése folyt az intézetben. Kiugróan magas a TDK (14), BSc (30), MSc(24) témavezetések száma, ami az intézet attraktivitásának bizonyítéka a földrajzi távolság ellenére! Hét posztdoktoruk dolgozott külföldi vezető intézményekben.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatás 2012-ben is 6 osztályvezető irányításával, önálló témagazdálkodású kutatócsoport, illetve laboratórium kereteiben folyt. A beszámoló követi a szervezeti sémát.

Nanoszerkezetek Osztály (14 fő, 7 kutató, 1 technikus / 6 PhD-hallgató)

Az osztály feladata szén nanoarchitektúrák (egyedi nanoszerkezetekből felépülő nanorendszerek) létrehozása és jellemzése, különös hangsúllyal a grafén alapú nanoarchitektúrák előállítására és vizsgálatára, valamint a természetes fotonikus kristályok kutatására és bioinspirált mesterséges fotonikus nanoszerkezetek előállítására, és ehhez nanométeres felbontású litográfiai módszerek fejlesztése.

Kémiai gőzfázisú leválasztással Cu(111) egykristályon CVD növesztett hullámos grafén nanomembránokat találtak, jellemzően 5 nm széles árkok fölé kifeszülve, szabályos, kb. 0,7 nm hullámhosszú és kb. 0,05 nm amplitúdójú periodikus oszcillációkkal. A nm tartományba eső görbületű grafén elektronszerkezete alapvetően eltérő: az elektrokémiai potenciálja lokálisan eltolódik és nagy pszeudo-mágneses tér lép fel. Ha a kristályos grafénréteg görbületi sugara összemérhető a rácsállandóval, a kontinuum-mechanika érvényét veszti, ezért kvantummechanikai szimulációval értelmezték a kísérleti deformációs adatokat. Eredményeiket a Nature Physics-ben közölték (Nature Physics 8, 739 (2012); doi:10.1038/nphys2389). A felfedezés hordereje a grafén bandgap-engineering szempontjából IC gyártási perspektívában óriási!

CVD grafén szemcsehatárok (GB) atomi- és elektronszerkezetét tanulmányozták STM topográfiai, spektroszkópiai adatok, valamint ab-initio sűrűségfüggő számítások összehasonlításával. A GB-k lokális állapotosságát a Dirac-pont körüli lokalizált állapotok (gap-beli állapotok) dominálják. STM segítségével közvetlenül tudták vizsgálni a GB-k elforgatási szögét és elektromos tulajdonságait. A Dirac-pont közeli állapotok összevetése ab-initio számítások eredményeivel azt mutatja, hogy a kettős koordinációjú szénatomok játszanak meghatározó szerepet az GB-k elektron-szerkezetének kialakulásában.

Hullámcsomag-dinamikai számításokkal (WPD) megmutatták, hogy a szemcsehatárok nm-es vezetőket, illetve hullámvezető csatornákat okozhatnak a grafénben. A két szélén szemcsehatárokkal határolt grafén nanoszalagban (GNR) a kvázirészecskék energiájuk szerint eltérően viselkednek. Legtöbb energián, hullámtöréssel áthaladnak a szemcsehatáron, sajátos energiákon azonban becsatornázódnak a szemcsehatárokba kiterjed lokalizált állapotokat alkotva (Phys. Rev. B (2012) 85, 125443).

Különböző periodikus szemcsehatárokon vizsgálták a hullámterjedést; a kísérletileg is kimutatott (5-7)GB nyálabosztódást és lokalizációt is mutat. Vizsgáltak egy kiterjedt, ötszögekből és nyolcszögekből felépülő lineáris hibát is, amely esetében a két szemcse egymással bezárt szöge 0° . Az azonos orientáció ellenére a transzmisszió aszimmetrikus, és a Fermi energia felett 2,6 eV minimumot mutat.

Polarizált fényel tették láthatóvá a grafén CVD során alkalmazott Cu hordozó szemcse-szerkezetét és az eltérő Miller indexű lapokon kialakuló karakterisztikus lépcsőket. A grafén krisztallitok sárga, vagy lila színben láthatók a szürke Cu háttéren, ami a polarizált fény szelektív becsatolódásának tulajdonítható. A lépcsőmentes részekben nem figyelhető meg szín.

Egyes lepkék szárnyainak színét fotonikus tiltott sávval (PBG) rendelkező anyagok, dilektrikumokból felépülő nanokompozitok adják, amelyek jellemző méretskálája a száz nanométeres tartományba esik. Bizonyos hullámtartományokat szelektíven visszavernek, így színt hoznak létre pigmentek nélkül is, melyet a szerkezet és az anyagi összetétel (törésmutató) határoz meg. A „szivacs-szerű” PBG esetén a lepkeszárnyak gyors színeltolódást mutatnak, ami lehetővé teszi a levegőben előforduló illékony anyagok szelektív kimutatását. Elsőként mutatták ki, hogy a kapilláris kondenzációnak köszönhetően a nanopórusokban cseppfolyóssá váló gőzök törésmutatójának különbsége teszi lehetővé az egyes anyagok azonosítását.

Komplex Rendszerek Osztály (8 fő, 7 kutató, 1 mérnök)

Az osztály feladata a nem-egyensúlyi rendszerek statisztikus fizikai elemzése egyebek közt sokszereplős evolúciós játékelméleti modellekkel, inhomogén gráfokon, nagy adathalmazokban mutatkozó hasonlatosságok matematikai elemzése megfelelő algoritmusok kifejlesztésével.

Az emberi és állati viselkedés kísérleti kutatásában központi szerepet játszanak az ultimátum játékok, ezért a modellvizsgálatokat kiterjesztették térbeli evolúcióra. A numerikus módszerekkel elért eredmények – összhangban a kísérletekkel – egyrészt megerősítették a tisztességes (testvéries) magatartások evolúciós kialakulását, és rámutattak a stratégia-társulások kialakulására is, ha az utánzás pontossága nem tökéletes a térbeli rendszerben.

Az egyéni érdeket jobban figyelembe vevő evolúciós társadalmi dilemma helyzetet leíró modellek az egoista és testvéries magatartás strukturált együttlétezésének különböző lehetőségeit vázolták fel a paraméterek függvényében. Gyakorlati tapasztalatok motiválták a különböző jellegű büntetések hatékonyságának olyan számszerűsített elemzését, amelyek már figyelembe veszik a kapcsolatrendszer inhomogenitásait, a játékosok mozgását és még néhány egyéni tulajdonságot.

Az evolúciós potenciáljátékok szisztematikus vizsgálata hozta felszínre a kölcsönhatások (játékok) osztályozásának egy olyan lehetőségét, ami szerint a játék snóblizást képviselő komponense lenne a legegyszerűbb hajtóereje az állandó mozgást/változást (Red Queen effektust) fenntartó evolúciós folyamatoknak a biológiai és társadalmi rendszerekben.

Sokprocesszoros számítógépekre kifejlesztett algoritmusoknak köszönhetően sikerült pontos eredményeket elérni a fertőzés terjedésének elemzésében olyan rendszerekben, ahol a kapcsolt rendszert inhomogén és/vagy skálamentes gráffal jellemezzük. Az eredmények a hatványfüggvényszerű csillapodás meglétét (Griffiths-fázist) igazolták. Ugyanakkor az állandósult állapotban elsőrendű (ugrásszerű) átmenet történik, ha változik a fertőzés és gyógyulás mértékének aránya.

A népcsoportok kultúrájában és genetikai állományában megőrzött hasonlatosságok számszerűsítésére folyamatosan továbbfejlesztett algoritmusok és az adatállomány bővülése egyre pontosabb elemzést tesznek lehetővé. A jelenlegi vizsgálatok szerint a népzenei rokonsággal a genetikai adatok 82 %-ban fednek át.

Néhány vállalat igényét követve az osztály mérnökei továbbfejlesztették a korábban létrehozott képfeldolgozási és lényegkiemelő szoftverjeiket.

Vékonyréteg-fizika Osztály (22 fő, 14 kutató, 4 mérnök és technikus /4 PhD-hallgató/)

Az osztály feladata *polikristályos vékonyrétegek szerkezetfejlődésének* és a szerkezet-fizikai tulajdonság összefüggésnek a feltárása, alkalmazásorientált mikroelektronikai és kemény-bevonatok fejlesztése; *széles tiltotsávú félvezető szerkezetek* tulajdonságainak optimalizálása a hibaszerkezet megismerésén keresztül; kétdimenziós rétegek előállítás, modellezése és kapcsolatos *elektronmikroszkópos (TEM) módszerfejlesztések*.

Grafént választottak le CVD módszerrel saját előállítású Ni(111) hordozóra, az epitaxiális relációt és a grafén jó minőségét HRTEM, STM és Raman spektroszkópiai módszerekkel bizonyították.

Molekula dinamikai számításokkal javították a Ru(111) felületén növesztett grafén hullámosodásának modellezését, a határfelületi potenciál finomításával jó kísérleti egyezést értek el.

Egykristályos mágneses félvezető réteget állítottak elő utólagos hőkezeléssel amorfizált Ge-ba Mn-ionokat implantálva.

Amorf CuMn65% vékonyréteg szerkezetéről TEM és elektron diffrakció segítségével megállapították, hogy az amorf rövid távú rend (SRO) nagyon hasonló a kristályos, sokatomos elemi cellájú α -Mn rövid távú rendjéhez.

CuMn40% vékonyrétegben SiO₂-on olyan MnSiO határréteg keletkezik, amely diffúziós barrierként szolgál a Cu számára.

A szuperkeménység szerkezeti értelmezésére irányuló kísérletekkel elsőként mutatták ki, hogy a Si-mal adalékolt TiN (illetve CrN) rétegekben a kristályos TiN (illetve CrN) nanorészecskéket amorf Si₃N₄ nanoréteg veszi körül.

Számítógépes módszert fejlesztettek ki szemcsehatárok nagyfeloldású vizsgálatához a bonyolult döntési kísérleteket megtervezésére.

Megmutatták, hogy gyémánt hordozóra növesztett GaN/AlGaN szerkezetek hibasűrűsége jelentősen csökkenthető a hordozó előzetes nitridálásával.

HRTEM eredményekkel igazolták, hogy az ALD-vel növesztett ZnO réteg polikristályos a zafir, és epitaxiás a GaN hordozón, amit az eltérő misfit-tel magyaráztak (15% vs.3%).

TiC:a-C nanokompozit rétegek biokompatibilitását MG63 osteoblast-szerű sejtek ránövesztésével bizonyították.

Nonkristályos anyagok elektrondiffrakciójának szimulálását matematikai módszerekkel gyakorlati problémák modellezésére tették alkalmassá.

Megmutatták, hogy a CH₄ és CO₂ nedves reformálásánál előnyösnek bizonyult kétfémes katalizátor alkalmazása nem jár hasonlóan jó eredménnyel e gázok száraz reformálása során.

Periodikus szerkezeteket állítottak elő rendezett szilícium dioxid nanogömbök excimer UV lézer impulzusokkal való kezelésével, adatrögzítő rétegek előállítását célozva.

Megmutatták, hogy a FIB-ben végrehajtott ionbombázással előállított SiC-tartalmú nanoréteg (Si felületén) ellenáll a szokásos poli-Si marásnak.

Ionbombázás és XPS kombinációjával megmutatták, hogy a cellulóz-epoxy kompozit károsodása teherautó aláfutás-gátló alkalmazásban milyen kémiai változásnak köszönhető.

Mikrotechnológia Osztály (34 fő, 13 kutató, 7 mérnök, 9 technikus / 5 PhD-hallgató/)

Az osztály feladata a szenzorrelvek, új anyagok és 3D megmunkálási technikák, valamint az ezeket támogató ion-szilárdtest kölcsönhatások *feltáró kutatása* mellett integrált mikrorendszerek, mikrofluidikai és fotovillamos szerkezetek kutatása, beleértve a

nanoszerkezetek *integrációját* a „More than Moore”-elv szerint. Fokozottan kerülnek előtérbe a folyadékkezeléssel, jelölésmentes bio-detektálással, a Lab-on-a-chip rendszerekkel kapcsolatos orvos-biológiai kutatási kérdések, melyek kiterjedt multidiszciplináris kooperációs kényszert is jelentenek a felhasználókkal.

Az intézet legnagyobb létszámú osztálya, amely a tisztalabor infrastruktúrát üzemelteti kb. 25 nagyberendezéssel. Az osztály nagyon fontos küldetése, hogy hozzáférést biztosítson BSc-, MSc- és PhD-hallgatóknak a mikrotechnológiához és minősítő eljárásokhoz, működtesse a közös egyetemi laborokat (BME TTK, PPKE, ÓE), kielégítse az intézet és társintézetek mintapreparációs igényeit, a hazai és külföldi ipari partnerek K+F megbízásait. A beszámolási évben elért új eredmények:

Az ENIAC JTI – CAJAL4EU pályázat (www.cajal4eu.com) keretében orvos-biológia célokra, a szív és érrendszeri betegségek korai felismerésére hazai és külföldi partnerekkel fejlesztettek gyors, megbízható, multiparaméteres tesztek támogató diagnosztikai rendszereket, amelyek tartalmazzák az új mérési elveken működő szenzorokat, mintapreparációs modulokat és mikrofluidikai rendszereket.

Megbízható és robusztus mikro- és nanofabrikációs technológiákat dolgoztak ki a struktúrák létrehozásához; a mikro- és nanoméretű rendszerekben tapasztalható fizikai folyamatokat feltérképezve új elveken alapuló bioanalitikai, mikro- és nanofluidikai eszközöket valósítottak meg.

Szilícium/üveg anodikus bondolási technológiát dolgoztak ki vékony, pl. szilárdtest nanopórus membránokat is tartalmazó mikrofluidikai rendszerek megbízható létrehozására.

Optikai bioérzékelőkben a funkcionális réteggént szereplő polimer SU-8, PI, PMMA felületeknek PDMS-ben kialakított mikrofluidikai szerkezetekhez kötését valósították meg megfelelő felületkezelések (szilanizáció + oxigén plazma) alkalmazásával.

A párhuzamos elektromos (impedancia) és optikai detektáláson alapuló áramlási citometriai eszközök számára optimalizálták az SU-8 vastag polimerből és üvegből felépülő heterogén mikrofluidikai szerkezetek kialakítási technológiáját.

Eljárást dolgoztak ki PDMS alapanyagban kialakított csatornák felületi tulajdonságainak javítására a PDMS-t a térhálósodás előtt tenzid molekulákkal (TX-100, PDMS-PEO) módosítva, a folyadékminta, az abban megtalálható molekulák (pl. fehérjék) és a szilárdtest felületek között kialakuló kölcsönhatásokat figyelembe véve, jelentősen javítva a mikrofluidikai rendszerek hidrodinamikai ellenállását és a szabad felületeken tapasztalható nem-specifikus fehérjebekötődést.

Hidrodinamikai folyamatok vizsgálatára gyors prototípus gyártással, több rétegű 3D SU-8 öntőformát alkalmazva PDMS alapú mikrofluidikai rendszereket építettek. A mikroméretekben jellemző, alacsony Reynold's számokkal leírható lamináris áramlási tartományban is alkalmazható, kaotikus advekciót kihasználó mikrofluidikai szerkezetek viselkedését elemezték mind a molekuláris, mind a mikrorészecskék mérettartományában. A rendszerekben kialakuló áramlási folyamatokat (fluoreszcensen jelölt fehérje molekulák, illetve kiterjedt részecskék keveredése) képalkotó eljárásokkal vizsgálták és véges elem (FEM) modellekkel értelmezték.

Az orvosdiagnosztikai eszközök követelményeinek megfelelő mintapreparációs rendszerhez a hidrodinamikai viselkedés geometriai paraméter-függését elemezve egy teljes vért fogadni képes, a Zweifach-Fung bifurkációs elven alapuló vérplazma-szeparációs mikrofluidikai rendszert optimalizáltak és integráltak bioanalitikai érzékelő rendszerbe.

Kémiaiailag módosított nanopórusok és a bennük lejátszódó transzportmodulációs jelenségek kutatására integrált bioanalitikai tesztrendszereket hoztak létre; jelölésmentes, multi-paraméteres, extrém érzékenységgű detektálásra optimalizált szilícium-nitrid/arany membránban (FIB, EBAD), vizsgálták a pórusátmérő technológiai paraméterfüggését, módszert alkottak a marási folyamat *in situ* követésére és vezérlésére.

Nagyfeloldású mikroszkópiák segítségével felderítették a porlasztás atomi skálán értelmezhető folyamatait, Automatizált CNC (Computer Numerical Control) vezérelt – „nanofúrás” technológiát dolgoztak ki a pórusszám, elhelyezkedés és geometria pontos meghatározására.

A nanofluidikai rendszereket sikeresen alkalmazták biomolekulák (troponin-I) detektálására. A kialakított nanoszerkezeteket mikrofluidikai és elektromos címző hálózatba integrálták, amely magában foglalja az előzetes minta előkészítő (vérplazma szeparációs) rendszert is. A mikrofluidikai rendszerben használt felületmódosítási eljárás (passzíváló réteg felvitele ALD eljárással) jelentősen javította mind az elektromos, mind a fluidikai tulajdonságokat.

Mikrotechnológiai módszerekkel fejlesztettek neurális folyamatok követésére alkalmas, agyszövetbe beültethető integrált mikroelektrodát, amely megoldja a sokcsatornás elektromos jelelvezetést és a közvetlen hatóanyag bejuttatást az elektróda hosszában végigfutó eltemetett mikrofluidikai csatornákon át. Neurofiziológus partnereikkel demonstrálták az eszköz hatékonyságát, javaslatot tettek a farmakológiai alkalmazásra.

Mikrométer alatti SiN_x membránstruktúrákon a tömbi Si-tól elektromosan és termikusan elszigetelt gázérzékelő és THz-es sugárzást érzékelő szenzorokat valósítottak meg. A CO szenzor érzékenységet és időbeli stabilitását a katalitikus nanoszemesék pórusos hordozóit vizsgálva legjobb eredményt a Pt nanorészecskékkel érzékenyített AlO_x rétegekkel érték el.

Atomi rétegleválasztással (ALD) 100 nm alatti egykristályos ZnO réteget sikerült növeszteni GaN hordozón. A 10^{-4}Ωcm fajlagos ellenállású epitaxiás ZnO réteg új típusú nanoelektronikai eszközök kidolgozására alkalmas.

Fotonikai Osztály (19 fő, 17 kutató, 1 mérnök, 1 technikus, 4 PhD-hallgató/)

A Fotonikai Osztály feladata optikai és mágneses kiolvasási elven működő szenzor-rendszerek fejlesztésével molekulaszintű, elsősorban gyógyászati célú érzékelést megvalósítani és optikai karakterizációval (spektroszkópiai ellipszometria, Makyoh-topográfia) támogatni a funkcionális anyagok kutatását, illetve preparációját.

A rács-csatolt interferometriás metodika (GCI) fejlesztésében (CREOPTIX együttműködéssel, szeptembertől Lendület támogatással) új eredményük a két be- és egy kicsatoló ráccsal előállított hullámvezető, melyen a megnövelt érzékenyített tartomány precíz méretbeállításával a chipet multiplexelt kiolvasásra tették alkalmassá. A konkurens interferometriás módszerekkel ellentétben szenzor-chipük lekérdezése egyetlen expandált lézernyalábbal történik, amely mindkét becsatoló rácsot egyszerre világítja meg. Az interferencia-jel előállításához a laterálisan két részre osztott folyadékkristályos modulátorban csak a nyaláb felén történik fázismoduláció. Az interferometriás ágak szimmetrikus elrendezésével növelték a stabilitást és integrálhatóvá teszik a párhuzamos érzékelő csatornákat. Az eszköz érzékenysége tömbi törésmutató meghatározásánál bizonyíthatóan jobb, mint 10^{-7} , a nagy fázisfelbontás jelölésmentesen, referencia-nélkül 1 pg/mm^2 alatti szintig teszi lehetővé a felületen adszorbeált molekulák sűrűség-meghatározását.

Az osztály a P3SENS (www.p3sens-project.eu) FP7-es multidiszciplináris (fotonikai, mikrofluidikai, biokémiai és anyagtudományi) projekt részeként sokcsatornás optikai

bioszenzor fejlesztésben vett részt agybetegségek korai detektálására vérből (pl. az agyvérzés során fellépő ischémias degradáció megelőzésére). Sikerrel funkcionálították a biochipet felületi kémiai módszerekkel és tesztelték a receptorok viselkedését nagyfelbontású jelölésmentes optikai bioérzékelő módszereikkel.

A sikeresen zárult NANOMAGDY FP7-es projektben biokompatibilis magneto-optikai nanorendszereket fejlesztettek orvosi gyakorlati alkalmazásra, onkológiai képalkotáshoz. Kettős magneto-optikai szondájuk képes a festék és a mágneses nanorészecskék egyidejű detektálására sebészi beavatkozásoknál. A rendszer prototípusát az EURORAD cég készítette el, ami tartalmazza a detektor-fejet (a szonda egy tokban tartalmazza a mágneses és az optikai érzékelőt) és az elektronikai modult. A rendszerük a tesztek során mind a szondának a képmezőben való elhelyezésében, mind a „forró, illetve hideg” területek azonosításában pontos eredményt adott. A gyártó további 3 fejre adott megrendelést az MFA-nak.

Legújabb roncsolás mentes eljárásuk a Magnetic Adaptive Testing (MAT) mágneses alhurkok szisztematikus mérésén és kiértékelésén alapul. Az optimális MAT paraméter beállítás és nukleáris reaktorok szerkezeti anyagait besugárzó neutron-fluxusa között jó korrelációt mutattak ki, ami sikerrel kecsget a jelenleg használt roncsolásos vizsgálatoknak ezzel a roncsolás mentes módszerrel való kiváltására.

2012-ben az MTA támogatást nyert a Lendület-pályázatuk „Advanced label-free biosensors for proteins and cells” témában. Ugyancsak EU és hazai támogatást nyertek az „E450EDL European 450mm Equipment Demo Line” ENIAC JU-projekt részeként optikai szelettérképező eljárás kifejlesztésére.

Kerámia és Nanokompozitok Osztály (17 fő, 9 kutató, 4 technikus / 4 PhD-hallgató/)

Az osztály feladata a kiterjedt nano-preparációs és kerámia-technológiai módszerekkel új tulajdonságú szerkezetek, kompozitok előállítás és vizsgálata, különös tekintettel a méreteffektusok nyújtotta előnyök kiaknázására.

Egy új, tisztán nedves kémiai lépésekből álló technikával sikerült hierarchikus ZnO nanoszerkezetet létrehozniuk. A nagy felületen megvalósított átlátszó, nagy fajlagos felületű, n-típusú félvezető oxid az exciton alapú napelemek egyik új komponense lehet.

Sikerrel végezték el vertikális, wurtzite kristályszerkezetű InAs nanoszálak mechanikai karakterizációját egy pásztázó elektronmikroszkópba szerelt robotkar-pár segítségével. A nanoszálak hajlítási modulusza 43,5GPa-ra adódott, amely jelentősen alacsonyabb, mint a tömbi köbös InAs-re illetve InAs nanoszálakra irodalomban közölt a korábbi adatok.

Sikerült előre kialakított elektródákról alacsony hőmérsékleten (95°C) horizontálisan növekvő ZnO nanoszálakat készíteniük, ami lehetővé teszi a nanoszál integrálását nagy kihozatalú planár IC technológiába. Mivel ezek a nanoszálak sorosan a szilícium hordozó oxidrétegen nőttek, a töltéshordozó-sűrűségük a hátsó kapu-feszültséggel modulálható, így a nanoszál alapú eszköz érzékelő tulajdonságai javíthatók.

Mezopórusos szilikával vontak be arany nanorudakat. Ezekből sikeresen készítettek Langmuir-Blodgett filmet, így a kéreg pórusai átjárhatóságának vizsgálata *ex situ* módon, spektroszkópiával vált lehetővé. A pórusokon keresztül reaktív specieseket juttattak a pórusos kérgen belüli térfogatba, ezáltal indukálva kémiai reakciót a nanoméretű „reakcióedényben”.

Kimutatták, hogy nanografittal erősített kerámia anyagukban az alapmátrix szívósságát 40-50%-kal növelik meg a kerámiaszemcsék közé beékelődött grafén lapkák, amelyek a szemcsék alakját is megváltoztatják. A szívósságnövekedés a grafén lapkák által okozott repedéstartó hatásnak, azok áthidalásának, elágazásának tudható be.

Bizonyították a biogén anyagokból előállított nano-hidroxiapatit osseogenerációra és csontpótlásra való alkalmasságát. A tojásból előállított nano-hidroxiapatit finomabb újsont-szerkezetet, valamint gyorsabb felszívódást eredményezett, mint a kereskedelemben is hozzáférhető szintetikus nano-hidroxiapatit.

Az elméleti sűrűségig beszinterelt jó mechanikai, termikus és kopásálló tulajdonságokkal rendelkező tömbi nanokompozitokat állítottak elő. A különböző összetételű alumínium alapú nanokompozit porok szintézisét nagy energiájú őrléssel, gyors szinterelését nagy nyomáson végezték.

2012-ben ipari megrendelés alapján jelentősen bővült a hagyományos műszaki nitridkerámia-termékek előállítása.

b) Tudomány és társadalom

Az MFA szakmai vezetésével működő IMNTP – Integrált Mikro/Nanorendszerek Nemzeti Technológiai Platform a finanszírozás hiánya ellenére folyamatosan tartja a kapcsolatot az MFA által fenntartott irodán keresztül az elektronikai ipar szereplőivel.

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, a tárgyévben a gyártásba vitelének előkészítése folyt.

Az intézet által hagyományosan megszervezett MFA Nyári Iskola a tárgyévben 25 középiskolás számára biztosított bentlakásos egyhetes lehetőséget a tudományos kutatásba történő bekapcsolódásra. Az MFA által létrehozott Nanobusz országosan számos helyszínen szerepelt óriási sikerrel a tudománynépszerűsítésben és nano-ismeretterjesztésben.

Az MFA Nyílt Napok (tavaly 150–200 látogatóval) az érdeklődő adófizetőknek biztosítanak lehetőséget az intézet kutatómunkájába való betekintésre.

A társadalomtudományok számára természettudományos háttérrel biztosító evolúciós játékelmélet módszereit, céljait, illetve eredményeit különböző fórumokon (egyetemi előadássorozatok, szemináriumok, nemzetközi nyári iskola, blogos találkozók) népszerűsítették.

Igen széles körben (rádió, TV, előadások, könyv) sikerült ismertetni a különböző népcsoportok zenéje és nyelve közötti rokonság (hasonlatosság) számszerűsítésére kidolgozott módszerük eredményeit és ígéretes jövőbeli alkalmazásait.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai kapcsolatok

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége

2012-ben egy fő szerzett PhD-fokozatot. Az MFA-ban hat emeritus és négy kinevezett egyetemi tanár, egy docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozik. Vezető munkatársaik zöme oktat az ELTE, BME, SE, PE, DE, ME, SZTE, PTE, PPKE, BMF különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, doktori és habilitációs tanácsának, többen a doktori iskolák alapító, ill. tisztségviselői. Az intézetben működik a veszprémi Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar Nanoszenzorika Professzori

Laboratóriuma, a BME VBMK-ral közös Nanokémiai Laboratórium, a ÓE 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. 2012-ben 27 hallgató folytatta PhD-kutatásait az MFA-ban.

Részvétel a hazai tudományos közéletben

Az MFA kutatói adtak egy MTA lev. tagot, három fő MTA doktorképviselőt, egy-egy tagot a Matematikai és 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, a VEAB egy tagja, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagja. Az MFA delegálta az OTKA Kollégium két tagját, a Fizika Zsűri Elnökét, az Informatikai és Villamos Zsűri egy tagját, az ELFT tanács egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport elnökét, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport egy vezetőségi tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat elnökét és 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 kapcsolatok

A Nanoszerkezetek osztály keretében működött a Koreai-Magyar Nanotudományok Közös Laboratórium az MTA és a Koreai Alapkutatói Tudományos Tanács közötti egyezmény keretében.

Egy fő a European Materials Research Society tanácsának tagja lett. Hárman az EMRS Fall Meetingen szimpóziumot szerveztek.

Egy fő a Conference on Applied Crystallography és az EMAS-2012 Workshop szervezésében vett részt.

Rendszeres a kapcsolat a londoni Brown University-vel, egy ottani professzor az MFA tanácsadója.

Kutatási együttműködés a svájci Creoptix céggel (Kaspar Cottier) új műszert eredményez.

Koreai-magyar workshopot szerveztek „Hungarian-Korean Technology Day” címmel a KOTRA és MTA szervezésében.

Két Indiai-magyar Tét pályázat keretében indult kutatás elektrochrom rétegek és kerámiák területén.

Az MTA TTK MFA a World Forum of Materials Research Institutes és az International Solid-state Lighting Alliance 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 szerepeltetni. 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 egy-egy japán, osztrák, horvát és szlovák kapcsolatuk volt.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok

Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca, PLoS ONE, Inzynieria Materialowa (Kiadja Sigma Not, Warsaw), Nanopages, valamint a „The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy”, „IEEE Sensors Journal” szerkesztőbizottsági tagja. A European Microbeam Analysis Society elnökhelyettes, IUVSTA hazai képviselő, IUVSTA Nemzeti Bizottság több tagja, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, EUROSENSORS International Steering Committee tagja, ENIAC Scientific Council tagja.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

OTKA: A tárgyévben 1 PD- és 4 új kutatási OTKA-pályázatuk nyert támogatást.

KMR: Öt új pályázatot nyertek.

MTA Lendület-pályázat: kutatócsoport alakításra.

Bolyai Kutatói Ösztöndíj: Két fő új nyertes a tárgyévben (2010–11-ben 4+5)

TÉT: Három új pályázatuk nyert.

Külföldi pályázatok

3 új EU-pályázat

Egy US Templeton Alapítványi ösztöndíj

Díjak, címek, fokozatok

Magyar Arany Érdemkereszt; a Miskolci Egyetem díszdoktora; MTA levelező tagi jelölés; Fizikai Fődíj; ELFT Schmid Rezső Díj; MTA Professor Emeritus; Professor Emeritus Instituti (2 fő); APS kiváló bírálója; TTK Fiatal Kutatói Díj; megosztott TTK Fiatal Kutatói Díj (2 fő); MFA Ifjúsági Díj(2 fő); MFA Kutatói Díj (2 fő); MFA Kiváló Kutatástámogatásért Díj (3 fő).

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tapasztó L, Dumitrică T, Kim SJ, Nemes-Incze P, Hwang C, Biró LP: Breakdown of continuum mechanics for nanometre-wavelength rippling of graphene. Nature Physics, 8(10): 739-742 (2012)
2. Szolnoki A, Perc M, Szabó G: Defense mechanisms of empathetic players in the spatial ultimatum game. Phys Rev Lett, 109(7): 078701 (2012)
3. Frey K, Iablokov V, Sáfrán G, Osán J, Sajó I, Szukiewicz R, Chenakin S, Kruse N: Nanostructured MnOx as highly active catalyst for CO oxidation. J Catal, 287: 30-36 (2012)
4. Biro LP, Nemes-Incze P, Lambin P: Graphene: nanoscale processing and recent applications, Nanoscale, 4(6): 1824-1839 (2012)

5. Baji Zs, Lábadi Z, Horváth ZsE, Molnár Gy, Volk J, Bársony I, Barna P: Nucleation and growth modes of ALD ZnO. *Cryst Growth Des*, 12(11): 5615-5620 (2012)
6. Fekete Z, Nagy P, Huszka G, Tolner F, Pongrácz A, Fürjes P: Performance characterization of micromachined particle separation system based on Zweifach–Fung effect. *Sensor Actuat B Chem*, 162: 89-94 (2012)
7. Kurunczi S, Hainard A, Juhász K, Patkó D, Orgován N, Truck N, Sanchez J-Ch, Horvath R: Polyethylene imine-based receptor immobilization for label free bioassays. *Sensor Actuat B Chem*, 1(1): 1-10 (2012)
8. Czigány Zs, Misják F, Geszti O, Radnóczy Gy: Structure and phase formation in Cu–Mn alloy thin films deposited at room temperature. *Acta Mater*, 60(20): 7226-7231 (2012)
9. Patko D, Cottier K, Hamori A, Horvath R: Single beam grating coupled interferometry: high resolution miniaturized label-free sensor for plate based parallel screening. *Opt Express*, 20(21): 23162-23173 (2012)
10. Oh S, Nagata T, Volk J, Wakayama Y: Nanoimprint for fabrication of highly ordered epitaxial ZnO nanorods on transparent conductive oxide films. *Appl Phys Express*, 5: 095003-1-095003-3 (2012)
11. Labar JL, Adamik M, Barna BP, Czigany Z, Fogarassy Z, Horvath ZE, Geszti O, Misjak F, Morgiel J, Radnoczi G, Safran G, Szekely L, Szuts T: Electron diffraction based analysis of phase fractions and texture in nanocrystalline thin films, Part III: Application examples. *Microscopy&Microanalysis*, 18(2): 406-420 (2012)
12. Khanh NQ, Lukács I, Sáfrán Gy, Erdélyi R, Fülöp E, Deák A, Volk J: Effect of nanosphere monolayer on the morphology of ZnO nanowires grown by hydrothermal method, *Mater Lett*, 79: 242-244 (2012)

Megjegyzés:

1 elfogadott magyar és 1 elfogadott nemzetközi szabadalmuk, illetve 2 közzétett hazai szabadalmi bejelentésük volt a beszámolási évben.

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
SZERVES KÉMIAI INTÉZET

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67; 1525 Budapest, Pf. 17.
telefon: (1) 438 1110; fax: (1) 438 1145
e-mail: hajos.gyorgy@ttk.mta.hu; honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A Szerves Kémiai Intézet a Természettudományi Kutatóközponton belül – korábbi kutató egységek szervezésével – 2012-ben alakult meg. A korábbi évek szerteágazó és aprózódó kutatási területeinek újrászervezése (új tematikák indítása, néhány lecsengő kutatási irány elhagyása) már 2011-ben megtörtént, így az új Szerves Kémiai Intézet már a szerves kémia és szerkezetvizsgálat kiválasztott területeinek kutatását tekintette tudományos feladatának. A preparatív szerves kémián belül ez öt kutatási irányt foglalt magába: 1) szénhidrátkémia, 2) heterociklusos kémia, 3) organokatalízis, 4) szupramolekuláris kémia, 5) polimer kémia. Az új intézeti szerveződés kimagasló érdeme, hogy a legfontosabb szerkezetvizsgáló módszerek tanulmányozása és fejlesztése szintén az intézeten belül folyik, így a feladatok szerves részét képezik. E vonatkozásban kiemelt feladatként szerepelt a kémiai folyamatok elméleti számítása és értelmezése. Mindezen feladatok nem csupán az egyes területeken végzendő kutatásokra, hanem azok összehangolt működésére is irányulnak.

A kutatóhely kiemelt közfeladata az egyetemi elméleti és gyakorlati oktatás. Elvárás a vezető kutatóktól főelőadások és speciálkollégiumok tartása az egyetemeken. A gyakorlati oktatás vonatkozásában a graduális és posztgraduális laboratóriumi kutatások (egyetemi szakdolgozatok kísérleti munkája, PhD-kutatási munkák stb.) az intézeti feladatok szerves részét képezik.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szénhidrátkémiai kutatások

A heparin hatás-szerkezet összefüggés tanulmányozására egy heparin tetraszacharidot és három hexaszacharidot szintetizáltak. A hexaszacharidok szintézisét a korábban kidolgozott ortogonális védőcsoport-stratégia segítségével egyetlen közös intermedierből valósították meg. E szintézisekkel kapcsolatban olyan reakciókörülményeket dolgoztak ki, melyek között a szintézis több utolsó reakciója egyetlen lépésben megvalósítható, ezáltal nagymértékben egyszerűsítve e szintézisek kritikus lépéseit. Részletesen vizsgálták az elméleti számításokban használt O-metil, és a gyakorlatban használt O-benzil csoportok befolyását mind a glikozil donorok, mind a glikozil akceptorok esetében. Megállapították, hogy az O-metil származékokkal végzett elméleti számítások eredményei az irodalomban számos esetben jelentősen eltérnek az O-benzil éterekkel kapott sztereo-szelektivitásoktól és tendenciáktól.

Heterociklusos kémiai kutatások

Fenotiazinok új keresztkapcsolási reakcióit oldották meg. Az eredmény preparatív jelentősége mellett kiemelendő, hogy az új fenotiazin-származékok sorában figyelemre méltó (a referenciaként tekintett Verapamil hatását meghaladó) multidrog-rezisztenciát gátló vegyületeket ismertek fel és szintetizáltak.

Izokinolin-származékok körében kiemelkedő fluoreszcens vegyületeket állítottak elő, melyeknek biomarkerként történő alkalmazását tervezik. Kondenzált pirrolokhoz vezető szintetikus stratégiát dolgoztak ki keresztkapcsolásos reakciók felhasználásával. A jelentős preparatív értékű módszer számos új, pirrollal kondenzált gyűrűvázat eredményezhet.

Szupramolekuláris kutatások

Napjainkban a cianid-hidas Au–CN–M kétfémes szupramolekulák széleskörű kutatási érdeklődésre tartanak számot, mivel szerkezeti változatosságuk mellett gyakran különleges mágneses, lumineszcens, vapokróm, kettőtörő és negatív hőtágulást mutató tulajdonságokkal rendelkeznek. Az intézetben előállítottak olyan dicianoaurát(I)-alapú Au–CN–Sn egységekből felépített rendszereket, melyek Au•••Au kötések révén tovább szerveződtek a kristályrácsban és különleges gázadszorpciós valamint mechanokróm lumineszcens tulajdonságokat mutattak. Ezek az Au–CN–Sn egységekből felépített szerkezetek újszerű ioncsere reakcióban vettek részt, amely lehetővé tette Au–CN–M (M = Co, Ni, Cu és Zn) egységekből szerveződő szupramolekuláris komplexek egyszerű előállítását.

Organokatalitikus kutatások

A frusztrált Lewis párok területe egy viszonylag új kutatási terület, amely ugyanakkor jelentős potenciállal rendelkezik a katalízis területén a megközelítés újszerűsége miatt. A kutatócsoport célja, hogy felfedje ennek a területnek a lehetőségeit és ezt a tudást átültesse az ipari gyakorlatba. Az alábbi eredményeket érték el.

Kidolgoztak egy olyan méret-növelhető szintetikus eljárást, amellyel speciális, ún. méretkizárásos Lewis savak szintézisét tudják megvalósítani. Ezt a katalizátor-fejlesztési koncepciót nemrégiben fogalmazták meg és alkalmazták sikerrel számos, ipari szempontból jelentős reakcióban. Az új szintézismódszer fontos lépést jelent annak érdekében, hogy fémmentes katalitikus hidrogénezéseket – akár nagy tételben is – végre lehessen hajtani. Mivel a katalitikus hidrogénézés a kémiai ipar egyik legfontosabb reakciója, így eredményeik fontosak lehetnek abban, hogy mérgező és nem megújuló forrásból származó nehézfémeket (mint pl. a Pt, Pd vagy Ni) ki lehessen váltani akár ipari folyamatokban is.

A méretkizárásos elv alapján olyan katalitikus hidroszililezési reakciókat fejlesztettek ki, amelyek eddig nem tapasztalt szelektivitást mutattak. Ezáltal számos ipari szempontból fontos reakcióban nyújthatnak egyszerű és katalitikus megoldást (pl. észterek aldehidekké történő redukciója, Mukaiyama aldol reakció), amely eddig nehezen, vagy nem volt megvalósítható.

A kutatásokat kiterjesztették az ún. bifunkcionális, azaz a savas, illetve bázisos centrumot kovalens kötéssel összekötő frusztrált Lewis párok fejlesztésére is, aminek során azonban egy váratlan, a rendszer frusztráltságából adódó reaktivitást figyeltek meg. Ez a különleges átrendeződési folyamat a diotróp átrendeződés, amely reakció a természetben viszonylag gyakran fordul elő (elsősorban a terpének ciklizációja során), azonban a szintetikus eljárások esetén meglehetősen ritkán kiaknázott folyamat.

Kidolgoztak egy olyan eljárást, amely lehetővé teszi egy szuperstabil palládium-katalizátor alkalmazását a gyógyszerfejlesztés korai fázisában is, mivel a katalizátor robosztusságának köszönhetően már mikrohullámú reaktorban, magas hőmérsékleten is lehet katalitikus reakciókat kivitelezni jelentős bomlás nélkül. Rámutattak a katalizátor felhasználhatóságára a C-H aktiválásos reakciókban, mely által számos gyógyszeripari szempontból értékes molekula szintézise válik egyszerűbbé.

A terpének, illetve a terpenoidok a természetben található másodlagos metabolitoknak a legnagyobb (mintegy 60000 ismert vegyület), legváltozatosabb, de ugyanakkor biológiai

szempontból legjelentősebb csoportja. A népi gyógyászatban alkalmazott hatóanyagok jelentős mértékben terpenoid származékok, ennek ellenére meglepő, hogy a modern gyógyszerfejlesztések esetén elvétve találkozhatunk terpén származékokkal. Ennek egyik valószínű oka az, hogy a terpének kémiája a szintetikus kémia legösszetettebb, legnehezebb része, így nem csupán a célvegyületek szintézise, hanem a gyógyszeripari fejlesztésekhez nélkülözhetetlen származékainak a szintézise is nehézkes, komoly kihívást jelentő feladat. A modern szintetikus kémia mintegy 150 éve alatt tulajdonképpen két olyan szintetikus építőelem jelent meg, amelyek hozzájárultak, s mind a mai napig hozzájárulnak a terpén terület fejlődéséhez: a Hagemann észter (1903) és a Wieland-Miescher keton (1950). Az elmúlt évben a kutatócsoport egy új építőelem lehetőségét ismerte fel, amely szerkezetéből adódóan vélhetően meghaladja a korábbi két kulcsintermedier lehetőségeit. Sikeresült organokatalitikus módszer alapján megvalósítani ennek a vegyületnek a méretnövelhető, enantioszelektív szintézisét. Ezen túlmenően feltárták az új kulcs intermedier reaktivitását, számos cisz- és transz-dekalin származékot állítottak elő belőle, amelyek a Labán szuperfamilában fellelhető mintegy 7000 vegyületben megtalálható szerkezeti mintázattal megegyeznek. Az eredmények tükrében vélhető, hogy a kutatócsoport egy olyan új szintetikus megközelítést ért el, amely akár a terpenoid analógok gyógyszeripari fejlesztése előtt nyithatja meg az utat.

Polimerkémiiai kutatások

Több kiemelkedően új eredményt értek el az újszerű, nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók kutatása során. A kotérhálók nanoszerkezetén alapuló nanoreaktor koncepciót igazolva többféle új szerves-szervetlen nanohibrid anyagot állítottak elő. Feltárták ezek szerkezetét és alapvető tulajdonságaikat, valamint kutatásaik ezekkel az anyagokkal új típusú, nagyhatékonyságú nanokatalizátorokat eredményeztek. Többféle szerkezetkutató módszer együttes alkalmazásával felderítették egyes kotérhálók anomális duzzadási viselkedésének a szerkezeti okait, melyről a polimer kémia egyik legrangosabb folyóiratában számoltak be. Polielektrolit nanofázisokat tartalmazó kotérhálóval intelligens pH-szelepet valósítottak meg.

A multifunkciós polimerek kutatása során olyan új szintézis stratégiákat dolgoztak ki, amelyek jól definiált szerkezetű funkciós makromolekulákat eredményeztek mind kationos, mind pedig atomátadásos gyökös polimerizációval. Jelentős továbbá az az eredményük, amelynek során – tudásunk szerint a világon elsőként – sikerült kvázielő karbokationos és gyökös polimerizáció összekapcsolásával olyan makromolekulákat előállítani, amelyek két bizonyítottan biokompatibilis hidrofób és hidrofil polimer láncból épülnek fel.

Nagy figyelmet kapott világszerte az elmúlt évben két, a polimerek környezetileg előnyös előállításával, illetve lebontásával kapcsolatos, a szakterület vezető folyóirataiban megjelent munkájuk. Egyik olyan polimerizációs közeg felismerését jelenti, amely az iparban jelenleg használttal szemben számottevően jobb környezeti tulajdonságokkal rendelkezik. A másik munkájuk a világon a harmadik legnagyobb mennyiségben előállított polimer, a poli(vinilklorid) (PVC) környezetileg előnyös, enyhe oxidatív körülmények közötti lebontásának a felfedezését foglalja magában.

Elméleti kémiai kutatások

Egy magyar- finn ERA Chemistry projekt keretében, elméleti és kísérleti módszerek közös alkalmazásával, több organokatalitikus folyamat mechanizmusát is feltárták. A kvantumkémiiai számítások megerősítették, hogy egy újonnan kifejlesztett bifunkciós organokatalizátor kooperatív hidrogénhidak segítségével fejt ki hatását, melynek köszönhetően hatékonyan alkalmazható alifás és aromás iminek Mannich-típusú reakcióiban.

Aldehidek és nitroalkének organokatalitikus Michael-addíciójában sikerült azonosítani egy olyan köztterméket, mely sok esetben gátolja a reakciót, de annak sztereoselektív protonálásával (savas ko-katalizátorok alkalmazásával) a reakció továbbhaladhat a Michael termék irányába.

Új modellt javasoltak sebességi állandók számítására. Az eljárás számítási költsége egy egydimenziós szabadenergia felszín számítás költségének a nagyságrendjébe esik. Az eljárás mind klasszikus, mind kvantumkémiai modellek esetén nagy pontossággal elvégezhető. További konceptuális előnye, hogy a sebességi állandót közvetlenül lehet kinyerni a számításokból, anélkül, hogy aktiválási energiát számolnánk.

Kiterjedt (folyadékfázisú) modelleken végzett molekuladinamikai szimulációk eredményei alapján megállapították, hogy a toluolban oldott Pt(Bu₃)/B(C₆F₅)₃ Lewis pár asszociációja termodinamikailag kedvezőtlen. Másodlagos intermolekuláris kölcsönhatások következtében azonban kis koncentrációban, az oldatban lazán kötött asszociátumok jöhetnek létre, melyek reaktív közttermékként szolgálnak hidrogénaktiválási folyamatokban.

Az intézetben előállított új borán elméleti tanulmányozásával rámutattak arra, hogy a hidrogén aktiválása a korábban javasolt reaktivitási modellel értelmezhető, vagyis az aromás vegyület a boránnal úgynevezett frusztrált Lewis párt alkot, mely heterolitikusan hasítja a hidrogént. A keletkezett ion-pár közttermék energetikailag kedvezőtlen, de hidridtranszfer útján stabilizálódik.

Anilidok és aldehidek Pd-katalizált C-H aktivált keresztkapcsolási reakciójának mechanizmusát modellezték és javaslatot tettek a mechanizmusra. A karbopalladációs lépés után egy két-fém-magos komplex jön létre és a benzoil gyök reakciója ezen a komplexen keresztül zajlik. A kétmagos komplex képződésének hajtóereje entalpikus.

Kén-dioxid vízben való oldódását vizsgálták AIMD metadinamikai szimulációkkal és megállapították, hogy a folyamat első lépése a HSO³⁻ anion képződése. Az SO₂ molekula nemkötő elektronpárja alapvetően megszabja a víz támadás geometriáját. Az SO₂ körüli hidrátburok szerkezete a biszulfid képződést elősegíti, míg a szulfonát képződést gátolja.

Javított energiadekompozíciós sémát vezettek be, amely figyelembe veszi azt, hogy a kovalens kötések képződése során fellépő „ionos” energiakomponenseket helyesebb a kötésekhez, mintsem az egyes atomokhoz rendelni. Javított definíciót adtak továbbá a kötésrend- és vegyértékindexekre korrelált hullámfüggvények esetére.

Véglegesnek ígérkező definíciókat adtak az atomi teljes spinek (spin-négyzete) számítására mind 3-dimenziós mind Hilbert-térbeli analízis esetére, amelyek az összes megkívánható fizikai feltételnek eleget tesznek. Sikerült effektív atompályákat előállítani a Bader-féle AIM séma keretében, és vizsgálták ezek egyes elvileg is érdekes tulajdonságait.

Matematikai modellt dolgoztak ki izotóphelyettesítéses módszer tervezhetőségére, oly módon, hogy abban a lehető legkisebb hiba jelenjen meg.

Tömegspektrometriai kutatások

A Tömegspektrometria Laboratórium legfontosabb eredménye egy új, kromatográfián, tömegspektrometrián és ezzel integrált számítógépes analízisen alapuló vizsgálati protokoll kidolgozása. Ez lehetővé teszi biológiai folyadékokban igen kis mennyiségben előforduló glikoprotein izoformok azonosítását, mennyiségi meghatározását, mely nemzetközi összehasonlításban is áttörést jelent. A protokollt a szakterület egy vezető folyóiratában közzé tették, az ehhez kapcsolódó szoftver web-oldalukról elérhető.

A kidolgozott protokoll már az eltelt rövid idő alatt is bizonyította jelentőségét mind a kutatás, mind pedig a gyakorlati alkalmazás szempontjából. Ez képezi alapját a rákos megbetegedések korai felismerésére és a rákos folyamatok pato-mechanizmusának megértésére szolgáló kutatásainknak. Ennek keretében részletesen vizsgálták az AGP akut fázis protein glikoformjait, melyek (előzetes eredményeink szerint) mind rákos, mind kardio-vaszkuláris betegségek esetén megváltoznak, így orvos-diagnosztikai jelentőségük lehet. Ennek gyakorlati alkalmazására gazdasági partnerrel közös pályázatot adtak be.

b) Tudomány és társadalom

A Heterociklusos Kémiai Laboratóriumban felismert, multidrog-rezisztenciát mutató új fenotiazin származékok ígéretes vegyületek gyógyszerfejlesztési szempontból bakteriális fertőzések és daganatos megbetegedések kezelése szempontjából. Az eredmény különösen jelentős lehet a világszerte előretörő, ún. extrém drog-rezisztens (XDR) tuberkolotikus fertőzések terápiája területén.

A tömegspektrometriai kutatások néhány célkitűzése az orvos-biológiai kutatások élvonalába tartozik. Legfontosabb hosszú távú céljuk a természettudományos (ezen belül az analitika, tömegspektrometria és proteinkutatás) kutatások eredményeinek átültetése az orvosi gyakorlatba.

2011-ben beadásra került egy szabadalom a kutatóintézet spin off cége, a H4Sep Kft. (80% tulajdonrész) valamint a Sanofi Zrt. (20% tulajdonrész) részvételével, amely idén júliusban megkapta a nemzetközi szabadalmi védettséget is a WO/2012/093271 számmal. Az elmúlt időszakban tovább bővítették a katalizátor alkalmazási területét annak érdekében, hogy az új eredmények, a kiterjedtebb felhasználás révén, tovább segítsék a szabadalom értékesítését.

Ez széles körben érinti és érdekli a társadalmat, eredményeiket egyetemisták, gimnazisták körében tudományos-népszerűsítő előadásokon, laborbemutatók, TDK-munkák során ismertették.

Az intézet munkatársai aktív szerepet vállaltak középiskolás diákok és egyetemisták ismeretterjesztő oktatásában. „Szén-dioxid megkötő arany(I)tartalmú óriásmolekula előállítására” címmel került sor egyhetes programra a természettudományos pályaválasztást ösztönző, tehetséggondozását és utánpótlás-nevelését segítő „AKI kíváncsi kémikus” nyári kutatótáborban. A Népszabadságban „Ehető polimerek” és „Véres sztori a laborban” címmel, a Kémiai Panorámában „Elismerés a kvázikristályok felfedezéséért és az állhatatosságért. A 2011. évi kémiai Nobel-díj” címmel jelentettek meg közleményeket.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Egyetemi kapcsolatok

Az intézet kutatói aktív kapcsolatot tartanak az ELTE TTK, BME és SE egyetemekkel (doktori iskolákban Doktori Tanács tagjai, törzstagok, vezetőségi tagok).

Az intézet igazgatója „Elméleti Szerves Kémia” kötelezően választható kollégiumot és „Heteroaromás vegyületek kémiája” c. speciálkollégiumot tartott (heti 2 óra) (ELTE).

Az intézet kutatója „Anyagtudományi vizsgálati módszerek” tantárgy keretén belül a „Röntgendiffrakció” című előadást (2x3 óra időtartam) és Analitikai kémia laboratóriumi gyakorlatot tartott (BME).

Az Organokatalízis Laboratórium munkatársai aktívan vettek részt az ELTE oktatási tevékenységében (előadás tartása, 14x2 óra, valamint laboratóriumi gyakorlat tartása, egy félév, 14x1 nap).

„Fragmens alapú gyógyszerkutatás” kurzuson, illetve „Kristályok, szerkezetek, kristályosítás, fragmens keresés” címmel tartanak egyetemi előadást a BME-n.

Ipari kapcsolatok

Szerződéses kapcsolat a Servier-rel (2012-ben 200.000 Euro összértéket meghaladó szerződést kötöttek kutatás-fejlesztés területén) „Kondenzált heterociklusok szintézise” témakörben, valamint gyógyszeripari kutatás-fejlesztés területén. Ez volt az első olyan jellegű szerződéses tevékenység, ahol a megbízó az intézeti kutatócsoport eddig elért alapkutatási eredményre építette a kutatás-fejlesztési együttműködést.

Szerződéses gyógyszeripari kutatás-fejlesztési kapcsolat „Feszült gyűrűs vegyületek kémiájának feltárása és szintézise” tématerületen a Richter Gedeon Nyrt-vel. E munka keretében az intézeti kutatócsoport eredményei alapján, új szabadalmaztatható feszült-gyűrűs szerkezetek szintézisét valósítják meg. A Richter Gedeon Nyrt-vel „fehérje minták glikozilációs mintázatának meghatározása” területén is folytak szerződéses kutatások.

Két svájci vállalkozás (a parfümipari Givaudan és az agrokémiai Syngenta), a Sanofi cseh leányvállalata a Zentiva, valamint a Servier gyógyszeripari cég párizsi központja hívta meg az Organokatalízis Laboratórium vezetőjét előadást tartani. Ennek keretében ipari konzultációkra is sor került, kiemelendő, hogy egyik esetben a konzultáció célja elsősorban az általuk korábban kifejlesztett organokatalizátor ipari méretű alkalmazásával volt kapcsolatos.

Tömegspektrometriai ipari szerződéses vizsgálatokat végeztek a TEVA Gyógyszergyár, Debrecen számára (szennyezés vizsgálat), a Biosystem International Kft, Debrecen számára (proteomika), valamint a Glycom Kft., Budapest részére (szerkezetvizsgálat).

Nemzetközi tudományos kapcsolatok

Az Organokatalízis Laboratórium vezetőjét Szingapúrba, a NUS egyetemre hívták meg egy egyhetes előadókörútra és konzultációra. Ezen túlmenően két nemzetközi konferencián (Franciaországban és Angliában) volt meghívott előadó.

Szerződéses együttműködések folytak Olasz–magyar Tét 2012–2014 egyezmény keretében a Milano-Bicocca egyetemmel, ERA Chemistry (magyar–finn együttműködés) keretében ‘enolizáló organokatalizátorok fejlesztése’ terén a finn Jyväskylä-i egyetemmel. Eredmények: Elméleti és kísérleti módszerek közös alkalmazásával, több organokatalitikus folyamat mechanizmusát is feltárták. Az együttműködésből 2 közös publikáció született.

A Tömegspektrometriai Laboratórium szerződéses együttműködésben vett részt Ukrán-magyar MTA kétoldalú megállapodás keretében „Biomolekulák tömegspektrométerben végbemenő elemi reakcióinak modellezése” tématerületen. Együttműködő partnerintézmény: B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov, Ukrajna. Eredmények: Poliéter oligomereknek hisztidinnel képzett gázfázisú nemkovalens komplexein kimutatták, hogy a komplexeket többszörös hidrogén-híd kötések és koordinációs kötések stabilizálják, azáltal, hogy a polimer láncok körbeveszik a töltött amino csoportot. Szerkezetek modellezésénél fontos figyelembe venni a poliéter láncok ilyen „önszerveződését”. A munkából közös publikáció született.

Az Egykristály Röntgen-diffrakciós Laboratórium új kapcsolatot alakított ki a berlini Helmholtz-Zentrummal BESSY szinkrotron sugárforrás használatához.

Finn PhD-hallgató egyhónapos szakmai gyakorlaton vett részt az intézetben. A projekt egyik magyar résztvevője (Madarász Ádám) két hónapig vendégkutatóként dolgozott a finn Jyväskylä-i Egyetemen.

Intenzív szakmai kapcsolatot alakítottak ki a német „Institute for Organic Chemistry, Technical University Bergakademie Freiberg” kutatóhellyel „Izostrukturalitás és molekuláris izometritás vizsgálatok” témakörben. Az együttműködés keretében ritkán vizsgált peremen és laterálisan szubsztituált kalixarének konformációs viselkedését és zárványkomplex képzését tanulmányozták. A kutatásokból közös közlemény jelent meg.

Az intézet szervezésében külföldi előadók tartottak előadást Budapesten:

Prof. John R. Helliwell: Why does a lobster change colour on cooking? School of Chemistry, University of Manchester, UK, 2012. február 24.

Prof. Andreas Roodt: Perspectives in the Design of Radiopharmaceuticals as Drugs University of the Free State, Bloemfontein, South Africa, 2012. február 27.

Prof. D. L. Boger: Vinblastine, Synthetic and Mechanistic studies. The Scripps Research Institute, La Jolla, US „NOVARTIS LECTURES” sorozat keretében, 2012. május 23.

Dr. Guido Koch: The total synthesis of (+)-Discodermolide. Basel, Novartis, 2012. május 23. „NOVARTIS LECTURES” keretében

Részvétel nemzetközi rendezvények szervezésében

Az intézet munkatársai részt vettek

a „European Colloquium on Heterocyclic Chemistry szervezőbizottságában, kollokvium idején (Reading, UK, Aug. 13–17, 2012) rendezvényének megszervezésében és megtartásában,

a 29th Informal Meeting on Mass Spectrometry, 2012. április 29. – május 2. Olomouc, Csehország, szervezésében,

a 6th Central and Eastern European Proteomic Conference, 2012. október 14–17., Budapest, szervezésében,

a 27th European Crystallographic Meeting. August 6–11., 2012. Bergen, Norway szervezésében Szervezőbizottsági tagként,

az Executive Committee Meeting of the European Crystallographic Association, February 2012, Budapest szervezésében.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

„A glikozilációs folyamatok feltérképezése és kapcsolata a rákos megbetegedések patofiziológiájával” (OTKA NK83857) című pályázati témában vettek részt. A mintaelőkészítési módszereket továbbfejlesztették vérszérumból történő proteomikai, glikoproteomikai vizsgálatokhoz. Egy HPLC alapú módszer segítségével vérplazma proteinjeinek, glikoproteinjeinek elválasztását oldották meg, vizsgálták a módszer reprodukálhatóságát, meghatározták az elvesző anyagmennyiségeket, továbbá elkezdtek a módszer részletes optimalizálását a lehető legjobb elválasztás és kinyerés elérése céljából. Az eredményeket nemzetközi konferenciákon és tudományos publikációkban mutatták be.

A pályázat teljes támogatási összege 85 M Ft, ebből 2012-ben felhasznált rész 21 M Ft.

Az „Új szintézismódszerek kidolgozása és alkalmazása célzott hatásterületen aktív heterociklusos molekulák” (OTKA NK 77784) című pályázat során az elvégzett munka rövid értékelése: új katalitikus és szintetikus lépések kidolgozásával és fejlesztésével sokrétű munkát végeztek új gyűrűvázak előállítására, flash-vákuum pirolízises szintézis kidolgozására, gyógyhatású fenotiazinok felismerésére és szintézisére. Az eredményeket 18, főként magas

impakt-faktorú nemzetközi folyóiratban megjelent publikáció ismerteti, emellett több hazai és nemzetközi fórumon hangzottak el előadások. Az eredmények elérésében nélkülözhetetlen szerepet játszottak a résztvevő szerkezeti kémiai (főként NMR és MS-spektroszkópiái), elméleti kémiai és biokémiai laboratóriumok.

2012 szeptemberében lejáró támogatás, teljes értéke: 90 M Ft.

Az intézet „Önszerveződő szupramolekuláris arany komplexek” címmel Lendület programot nyert (LP2012-21/2012). Előállították és egykristály röntgendiffrakcióval szerkezetileg jellemezték egy kétmagvú arany(I)-makrociklus többféle módosulását. Tanulmányozni kezdték a vegyület különleges mechanokróm lumineszcenciáját, azaz a mechanikai erő hatására bekövetkező lumineszcens színváltozást. Vizsgálták az arany(I)tartalmú szupramolekula kristályszerkezete és a lumineszcens tulajdonságok közötti kapcsolatot. A pályázat teljes támogatási összege 147 M Ft, ebből 2012-ben felhasználható 11 M Ft volt.

Egy kutatójuk Bolyai János Kutatási Ösztöndíjat nyert el, 2012 szeptemberétől, 3 évre.

Egy kutatójuk „A szupramolekuláris kölcsönhatások szerepe egy- és többkomponensű szilárd fázisú rendszerek felépítésében” címmel OTKA K 100801 pályázatot nyert el. A pályázat keretében 2012-ben végzett munka fontosabb eredményei:

Nagyszámú újonnan szintetizált szerves és fémorganikus vegyület szerkezetét határoztuk meg és elemeztük, ahol a másodlagos kölcsönhatásokat szisztematikusan változtattuk, hogy megértsük a molekulák kristályban való elrendeződését irányító erőket. Egyaránt vizsgáltak egy- és többkomponensű rendszereket, zárványkomplexekeket és ko-kristályokat. A pályázati támogatás mértéke: 5.572 M Ft.

Egy kutatójuk Tét (francia–magyar) pályázatot nyert el „Bakteriális antibiotikum-rezisztencia leküzdése farmakoför analízis segítségével” címmel (TET_11_FR-SZKI0228). A pályázati támogatás értéke: 1,6 M Ft. Együttműködő partner: University of Marseille.

Egy kutatójuk Tét (osztrák–magyar) pályázatot nyert el „Proteomikában használatos tömegspektrometriai módszerek fejlesztése és alkalmazása” terén. Együttműködő partner: Vienna University of Technology / Institute of Chemical Technologies and Analytics. A pályázati támogatás értéke: 2 M Ft.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Takács D, Nagy I, Bombicz P, Egyed O, Jemnitz K, Riedl Z, Molnár J, Amaral L, Hajós Gy: Selective hydroboration of dieneamines. Formation of hydroxyalkylphenothiazines as MDR modulators. *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 20: 4258-4270 (2012)
2. Tárkányi G, Király P, Soós T, Varga Sz: Active conformation in amine-thiourea bifunctional organocatalysis performed by catalyst aggregation. *Chemistry-A European Journal*, 18(7): 1918-1922 (2012)
3. Szarka Gy, Domján A, Szakács T, Iván B: Oil from poly(vinyl chloride): unprecedented degradative chain scission under mild thermooxidative conditions. *Polymer Degradation and Stability*, 97: 1787-1793 (2012)
4. Aradi B, Turiak L, Misjak P, Paloczi K, Ozohanics O, Drahos L, et al (5, Vekey K): Proteomic analysis of thymus-derived apoptotic bodies and microvesicles. *European Journal of Clinical Investigation*, 42: 67-68 (2012)

**AZ MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2012-BEN**

Főbb mutatók 2012-ben

MTA Természettudományi Kutatóközpont*

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	686	Ebből kutató ² :	356	
PhD, kandidátus:	196	MTA doktora:48	Rendes tag és levelező tag:	5
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			10	
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			160	

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	559		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	530		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	39		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	25		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	383		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	350		
Könyv, atlasz	magyarul: 3	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 10	idegen nyelven:	28

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	1125,004	Összes független hivatkozás száma:	12759
Összes hivatkozás száma ⁸ :	14952		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	14	MTA doktora:	1
---	------	----	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	304		
poszterek száma:	238		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	69	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	77
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	53		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	125		
Témavezetések száma: TDK munka:	58	Diplomamunka (BSc):	106
Diplomamunka (MSc):	97	PhD:	177

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	3057 023	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	48	Teljes saját bevétel:	8668 532	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		5064	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		103		
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	461 254	E Ft		
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		67		
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	551 432	E Ft		
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		51		
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	356 746	E Ft		
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:				
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2991	E Ft		
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	7752 299	E Ft		

* A kutatóközponti adatok hitelesek, ellenőrzöttek; a kutatóközponton belüli intézeti adatok tájékoztató jellegűek

Részletezett pénzügyi adatok 2012-ben

MTA Természettudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	3057 023	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	8668 532	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	5064	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	461 254	E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	551 432	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	356 746	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	2991	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	170	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	1142	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	7750 987	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:		E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	118	Ebből kutató ² :	84	
PhD, kandidátus:	40	MTA doktora:15	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				26

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				126
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				121
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				10
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				19
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				80
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				73
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:		0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 2	idegen nyelven:		5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	213,97	Összes független hivatkozás száma (2011):	6439
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			7577

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			50
		posztterek száma:	52
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	21
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			15
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	20
Diplomamunka (MSc):	16	PhD:	23

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Molekuláris Farmakológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	66	Ebből kutató ² :	48	
PhD, kandidátus:	27	MTA doktora:7	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				17

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				76
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				72
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				2
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				3
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				66
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				65
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:		0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:		1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	212,21	Összes független hivatkozás száma (2011):	0
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			0

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	1
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			29
		poszterek száma:	28
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	9
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	14		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			21
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	11
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:	21

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	142	Ebből kutató ² :	79	
PhD, kandidátus:	43	MTA doktora:13	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				26

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	144		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	140		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	1		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	4		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	116		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	101		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven:	4

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	257,16	Összes független hivatkozás száma (2011):	2655
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			3006

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	99		
poszterek száma:	83		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	36	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	31		
Témavezetések száma: TDK munka:	14	Diplomamunka (BSc):	30
Diplomamunka (MSc):	27	PhD:	33

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Szerves Kémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	77	Ebből kutató ² :	62
PhD, kandidátus:	29	MTA doktora:	9
		Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			34

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			90
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			86
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			2
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			81
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			78
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	270,88	Összes független hivatkozás száma (2011):	0
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			0

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 3	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			24
		poszterek száma:	21
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	25		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			13
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	8	PhD:	22

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Enzimológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	106	Ebből kutató ² :	61	
PhD, kandidátus:	31	MTA doktora: ⁷	Rendes tag és levelező tag:	2
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, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				55
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				54
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				50
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				44
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:		0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:		2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	206,1	Összes független hivatkozás száma (2011):	2189
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			2586

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 6	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			36
		poszterek száma:	25
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			12
Témavezetések száma: TDK munka:	11	Diplomamunka (BSc):	8
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:	20

Főbb mutatók 2012-ben

MTA TTK Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	78	Ebből kutató ² :	35
PhD, kandidátus:	15	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 :			16

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			112
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			100
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			26
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			2
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			30
mindezekből recenzió, kritika magyarul: 4		idegen nyelven:	0
Megjelent könyv/monográfia, atlasz magyarul: 3		idegen nyelven:	0
könyvrész, könyvfejezet, térkép magyarul: 7		idegen nyelven:	15
Könyv szerkesztése ⁷ magyarul: 2		idegen nyelven:	2
Folyóirat, vagy sorozatszerkesztés magyarul: 1		idegen nyelven:	0

3. IDÉZETTSÉGI MUTATÓK (2011)

Összes hivatkozás száma ⁸ :	2233	Összes független hivatkozások száma:	1875
--	------	--------------------------------------	------

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Tud. előadások száma nemzetközi rendezvényen ¹⁰ :	66	hazai:	89
Nyilvános esemény megrendezése ¹³ :	3	kulturális rendezvények ¹⁴ :	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ :			13
Nemzetközi tudományos bizottsági tagság:	13	hazai:	12
Nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagság:	13	hazai:	17

6. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² :			33
Témavezetések száma: TDK munka: 19		Diplomamunka (BSc):	35
Diplomamunka (MSc): 22		PhD:	58

MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT

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

telefon: (1) 392 2512; fax: (1) 392 2598,

e-mail: titkarsag@wigner.mta.hu; honlap: wigner.mta.hu

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2012-ben

Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont (Wigner FK) szervezeti egységei a Részecske- és Magfizikai Intézet (RMI) és a Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet (SZFI), mely intézetek tudományos beszámolóit külön-külön is elkészültek és a további oldalakon megtalálhatóak.

A két intézetben a tudományos kutatás jól meghatározott tematikájú kutatócsoportokban folyik. A tudományos munka minőségéért, a kutatócsoport tevékenységéért közvetlenül a kutatócsoport vezetője felelős. A hasonló tematikájú kutatócsoportok kutatóosztályokba szerveződnek. Az osztályvezetők képviselik a kutatócsoportokat és azok érdekeit az intézeti fórumokon. 2012 év elején felülvizsgálták és megújították az RMI kutatócsoportjait és kutatóosztályait. Az SZFI-ben a tudományos tevékenység korábban is kutatócsoport centrikus szervezeti felépítésben zajlott, 2012 végén azonban itt is sor került ennek a felépítésnek a megújítására. Eredményként 39 kutatócsoport és 11 kutatóosztály jött létre a Wigner FK-ban, ahol a kutatóosztályok hasonló nagyságú kutatási potenciált képviselnek. A kutatócsoportok között szerepel 5 Lendület, valamint 1 ERC támogatásban részesülő kutatócsoport. A kutatóközpont vezetése támogatta, hogy a kutatócsoportok vezetésére fiatal és tehetséges munkatársak kapjanak megbízást, az osztályvezetők pedig a jelentős vezetői tapasztalatokkal rendelkező kutatók közül kerültek ki. 2012 végén megalakításra került a „Wigner kutatócsoport” cím és támogatási rendszer. A főigazgatói vezetői program megvalósításához kapcsolódóan 4 kiemelt kutatócsoport megalakítására lesz lehetőség a 2013. év során. A kiemelt kutatócsoportok pályázat eredményeként kerülnek kiválasztásra, ahol a pályázat alapját a 2012-ben elvégzett kutatómunka és a kutatócsoport következő 3 évre vonatkozó kutatási terve jelenti. A kiemelt státusz 1 évre szól, a pályázat kiírására minden év végén sor kerül.

A 2012 során létrejött, megújult szervezeti struktúra vált az alapjává a Wigner FK közös Gazdasági Osztályán (GO) vezetett számítógépes elszámolási rendszernek (ECOSTAT), ahol így kutatócsoport szinten vált lehetővé a kutatási tevékenység pénzügyi támogatása, egyben elemzése. A közös GO a két intézet gazdasági egységéből alakult 2012 elején. A csökkentett létszámból eredő problémákat a számítógépes háttér fejlesztésével, a könyvelői programok kiterjesztett alkalmazásával, a GO munkatársainak informatikai továbbképzésével, valamint új kollégák felvételével sikerült megoldani. A pénzügyi források bevonásával elvégzett technikai és HR-fejlesztés eredményeként a GO a csökkentett létszám mellett is alkalmas maradt a Wigner FK kutatási feladatainak nemzetközi színvonalon történő támogatására, továbbá képes az EU-standardokat követő elszámolási módszerek integrálására. Ezen felül a GO folyamatosan készül a Wigner FK kutatócsoportjainak a HORIZON 2020 programba való részvételének támogatására, amely a következő évek egyik kiemelt feladata lesz.

A KFKI Telephelyen található Könyvtár korábban az MTA SZFKI kezelésében volt, így 2012 elejétől átkerült a Wigner FK felügyelete alá. Ez az átalakulás kiváló alkalmat jelentett a már korábban tervezett teljes könyvtári revízió végrehajtására, amely 2012 során sikeresen le is zajlott. A kutatóközpontok kialakítása során döntés született az Izotópkutató Intézet könyvtárának a Wigner Könyvtárba történő beolvasztására, amely egy hosszú folyamat, s

2012-ben elkezdődött. A Könyvtár személyi állományának megújítása is megkezdődött, szem előtt tartva a 21. század könyvtár-informatikai feladatait és fejlesztési igényeit.

A Wigner FK Számítógépes Hálózati Központja (SZHK) egyúttal működtette és fejlesztette a KFKI Telephely összes intézményének számítástechnikai hálózatát, fejlesztette az ennek biztonságát növelő eszközöket. Továbbá az SZHK ellátja a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Program regionális központi feladatait is. Az SZHK ezeknek a feladatoknak csak akkor tud eleget tenni, ha a berendezések színvonala lépést tart a gyorsan változó követelményekkel, ami folyamatos fejlesztést igényel. 2012-ben sikerült MTA infrastrukturális pályázati támogatást szerezni 30 kW IT-teljesítményű számítógép-fürt klimatizálásának megoldására, valamint megvalósult a 10 Gbites hálózati sebesség befogadása. Ezek a fejlesztések jelentős mértékben javították a helyi IT-rendszer sebességét és megbízhatóságát. Az SZHK-ban található számítógépes felhő fejlesztésére nagy szükség lenne, azonban erre egyelőre nem sikerült anyagi forrást találni.

II. Közvetlenül a kutatóközpont vezetése alá tartozó kutatócsoportok kutatási eredményei, ezek jelentősebb publikációi

A kutatócsoportok alapvetően az intézetek alá rendelve, azonban mind kutatóközponton belül, mind kutatóközponton kívül keresték az együttműködési lehetőségeket, kutatóközponti szinten megvalósuló közös kutatási projekteken való részvételt. Ilyen a két intézet kutatócsoportjai által létrehozott, lézerfizikai kutatásokra és alkalmazásokra specializálódott, ELI Laboratórium, amely a Szegeden megépülő Extreme Light Infrastructure (ELI-ALPS) nagyteljesítményű lézerberendezésen végezhető Wigner kutatómunka összehangolására alakult. A szakértő munkatársak egyrészt az ELI-ALPS koncepcionális design-munkálataiban vesznek részt, aktívan hozzájárulva ezzel a szegedi berendezés mihamarabbi elkészültéhez. Párhuzamosan a Wigner FK-ban megtalálható lézerek és mérőberendezések integrálásával és továbbfejlesztésével (Helios Program) olyan kutatási programokat indítottak be, amelyek feladatai önállóan is elvégezhetőek voltak, illetve alapjául szolgálhatnak majd az ELI-ALPS melletti későbbi alkalmazásoknak. Így például 2012 végén a helyi eszközökkel Magyarországon elsőként sikerült létrehozni 1 femtométernél rövidebb lézerimpulzus felharmónikusokat. Helyi együttműködés kezdődött a molekuláris folyamatok extrém rövid lézerimpulzusokkal történő vizsgálatában is, amely kutatást az ERC is támogatja. Az ELI-ALPS elindulásáig ezek a helyi kísérletek biztosítják a Wigner kutatócsoportok nemzetközi élvonalba tartozását. Párhuzamosan sikerült bekapcsolódnival más európai kutatási projektekre is, mint például az AWAKE program. Ebben a nagy gyorsítóban (pl. CERN) előállított proton-nyalábok és a lézerekkel előállított plazmák kölcsönhatása eredményeként létrejövő plazmahullámok részecske-gyorsításra való alkalmazását vizsgálják, megalapozva ezzel egy széleskörű nemzetközi K+F együttműködést.

A 2012 során elnyert MTA infrastrukturális fejlesztési és felújítási források lehetővé tették, hogy az RMI és SZFI infrastrukturális háttér berendezéseinek egy része megújuljon, így például a röntgen spektroszkópia alkalmazási területén, valamint a Budapest Kutatóreaktor mellett a neutronokkal történő anyagvizsgálati alkalmazásoknál használt műszerek. Elkezdődött egy, a magfizikai módszereket alkalmazó anyagvizsgálati eljárásokat összefogó nyitott laboratórium létrehozása. Ez a laboratórium szorosan kapcsolódik a Wigner FK és az ATOMKI által közösen fenntartott HIPP (Hungarian Ion Physics Platform) programban résztvevő gyorsító K+F célú alkalmazásához. Ezen fejlesztések fő célja, hogy a Wigner FK-ban található kutatási infrastruktúra minél nagyobb része fölkerüljön az EU által elismert, nyitott infrastruktúrákat tartalmazó MERIL-listára.

A Wigner FK több kutatócsoportja is érdeklődik a nagysebességű grafikus kártyák tudományos számításokban való felhasználása iránt, átfogva ezzel az elméleti részecske- és szilárdtestfizika, a gravitációkutatás és a komplex-rendszerek viselkedésének szimulációs vizsgálata területét. A közös érdeklődés támogatására létrejött a GPU Laboratórium, amely integrálja a kutatóközponti törekvéseket, egyúttal hardware-oldalról támogatja a kutatók fejlesztési elképzeléseit. Megkezdődött egy új GPU-fürt beszerzése, amely egyben a GPU-kártyák programozásának helyi teszt területe is. Kiépítésre került egy szoros együttműködés a grafikus kártyákat gyártó céggel, amely költséghatékonyá teszi a beszerzéseiket. 2012-ben újra megrendezésre kerültek a GPU Napok, amely a témakör egyik hazai seregszemléjévé vált.

2012-ben a Wigner FK elnyerte a CERN által kiírt tendert, amely azt célozta meg, hogy a CERN-en kívül létrejöjjön egy olyan IT-infrastruktúra, amely a következő 7 évben kiszolgálja a CERN-ben folyó részecskefizikai adatfeldolgozás egyre növekvő igényeit, magas szinten kielégítve az SLA követelményeket. Az MTA és az NFM együttműködési megállapodása eredményeként 8,5 Mrd Ft támogatással 2013 nyarára megépül a Wigner FK-ban a Wigner Adatközpont. Ez az Adatközpont egyrészt otthont ad a CERN@WIGNER projektnek, valamint lehetővé teszi további, jelentős méretű IT-infrastruktúrát igénylő tudományos kutatási programok befogadását. A fejlesztés része volt, hogy 2012 végére, Európában először, a CERN és a Wigner FK között jött létre egy nagy megbízhatósággal működő 100 Gbit/s sebességű adatátviteli kapcsolat. Ez az IT-kapacitás és a kiemelt adatátviteli sebesség nagy jelentőséggel bír a 2014-ben kezdődő HORIZON 2020 programban való sikeres magyar részvétel kapcsán. 2012-ben megkezdődött ezen lehetőségek feltérképezése is.

A kutatóközponti szinten megvalósult, illetve elkezdett projektek eredményei még ezután várhatóak, illetve több tudományos eredmény az adott kutatócsoport neve alatt, az intézeti beszámolókból található meg. Fontos kiemelni, hogy 2012 a kezdés éve volt, amikor megkezdődött a két intézet közötti együttműködési csatornák feltérképezése, a lehetőségek kihasználásának kidolgozása. A közös gondolkodás fókuszpontja azonban rendszeresen a HORIZON 2020 programban való sikeres szerepelésre való felkészülés volt.

A következő oldalakon megtalálható az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont RMI és SZFI intézetek részletes tudományos beszámolója.

MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT
RÉSZECSCKE- ÉS MAGFIZIKAI INTÉZET

1121 Budapest Konkoly-Thege Miklós út 29-33., 1525 Budapest Pf. 49.
telefon: (1) 392 2512; fax: (1) 392 2598,
e-mail: levai.peter@wigner.mta.hu; honlap: www.rmki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Az MTA Wigner FK Részecske- és Magfizikai Intézet (RMI) eredményes kísérleti és elméleti felfedező kutatást végzett a részecskefizika, a magfizika, a gravitációfizika, a plazmafizika, a hűtött atomok fizikája, az űrfizika, a nukleáris szilárdtest-fizika, a nukleáris anyagtudomány és a komplex rendszerek kutatása területén. Fejlesztési tevékenységének területei: lézerfizika, nukleáris analitika, fúziós plazmadiagnosztika, űrtechnika, nagy sebességű adatfeldolgozás, egyes spektroszkópiák, speciális igényeket kiszolgáló elektronikai, mechanikai és információtechnológiai 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 nehézionimplantert, az MBE molekulanyaláb-epitaxia berendezést, a GINA polarizált neutron-reflektométert, a kutatást kiszolgáló Grid rendszerű és más nagykapacitású számítógépeit.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion-fizika

A RMI kutatói a CERN-ben folyó mérések közül az ALICE, a CMS, a TOTEM, az ATLAS, az NA61 és az ASACUSA kísérletekben vettek részt.

A 2012-es évben a legjelentősebb eredmény egy, a Standard Model Higgs bozonjához hasonló új részecske megfigyelésében való érdemi részvétel volt. Ehhez a fontos eredményhez a CMS-ben a nyomkövető detektor üzemeltetésével és kalibrációjával, a fizikai eredményekhez elkerülhetetlenül fontos mérések (töltőtrészecske-nyom és elsődleges kölcsönhatási pont rekonstrukció és luminozítás mérés) támogatásával, az online és offline adatminősítésben való részvétellel, valamint az analízisekben használt szimulációk elkészítéséhez számítástechnikai kapacitás (Grid CMS Tier-2 központ) üzemeltetésével járultak hozzá. Az ATLAS-ban pedig az elektromágneses kaloriméterek üzemeltetése, adatfelvételük biztosítása, elektronok felismerésének optimalizálása és az új részecske négy leptonba történő bomlásának megfigyelése volt a fő feladatuk.

Létrehozták és működésbe állították az RMI CMS állomását, amely révén az észlelőrendszer bizonyos elemeinek irányításával és a regisztrált adatok folyamatos ellenőrzésével, minősítésével lehetőség nyílt az adatgyűjtésben való közvetlen részvételre anélkül, hogy ehhez a CERN-be kellene utazni. A rendszeres felügyeleti munkán kívül az állomás arra is alkalmas, hogy a látogatóknak, és kiemelten az érdeklődő középiskolásoknak, demonstrálja a kísérleti fizika csúcserendezésén folytatott kutatómunka szépségét.

Az ALICE kísérletben az 5 TeV tömegközépponti energiájú proton-ólommag ütközések elméleti és kísérleti vizsgálata során tett modell-jóslataik jó egyezést mutattak az első mérések eredményeivel.

A CMS kísérletben megmérték a 7 TeV energiájú rugalmatlan proton-proton szórás hatáskeresztmetszetét; meghatározták a proton-proton ütközésekben keletkezett töltött pionok, kaonok és protonok eloszlásait 0,9; 2,76 és 7 TeV energiákon. A kapott eredmények azt mutatják, hogy a részecskék átlagos merőleges impulzusa a tömegükkel és az esemény részecskeszámával gyorsan nő. A kísérlet Pb-Pb ütközéseket tanulmányozó nehézion-fizikai programjában a töltött részecskék nukleáris módosulási tényezőjének mérésében, a jet-részecske korrelációk kiértékelésében, az Y részecske és gerjesztett állapotai elnyomásának analízisében, valamint a Z bozon keltési valószínűségének meghatározásában vettek részt.

Az NA61 kísérlet keretében megmérték a 31 GeV/c nyalábenergiájú proton-szénmag ütközésekben keletkezett pionok és kaonok eloszlásait, amelyeket a T2K neutrínó kísérlet kiértékelésében tudnak majd használni. Az intézetben kifejlesztett alacsony impulzusú részecske-detektorral felvett proton-ólommag adatok a nehézion-ütközések fontos összehasonlítási alapját képezik.

A töltött részecskék energiaveszteség-rátájának becslésére széles körben alkalmazott levágott átlagolást a súlyozott átlagok körére általánosították. A töltött részecskék energiaveszteségét szilíciumban egy egyszerű analitikus parametrizációval közelítették. A javasolt modellt a korábbi eljárásoknál jobb eredményekkel alkalmazták a részecskék energiaveszteség-rátájának meghatározására és a detektorok erősítéseinek kalibrációjára.

A közös RMI-ELTE REGARD detektorfejlesztő csoport által épített új típusú sokszálas kamrák kiválóan szerepeltek a CERN-ben elvégzett tesztméréseken és várhatóan az ALICE kísérlet új, nagy impulzusú detektorának a részei lesznek. Az érdekes visszaszórási tartományt lefedő új típusú TPC detektorok a sikeres próbamérések követően az év végén LMPD néven beépült az NA61 kísérletbe. Önálló fejlesztésként két CCC (Close Cathode Chamber) alapú részecske-pozíció meghatározó detektor pedig a VHMPID prototípus összeállításába került beépítésre.

A REGARD csoport tapasztalatait interdiszciplináris kutatásokban is hasznosította. Az általuk épített mobilis, energiagazdaságos és olcsó „ kozmikus müon tomográf ” a világürből jövő kozmikus sugárzás segítségével képes új barlangi üregek felfedezésére. A detektor a Molnár János-barlangban és a pilisi Ajándék-barlangban terepi környezetben is kiválóan viselte el az extrém természeti körülményeket.

Anyagtudomány kísérleti magfizikai módszerekkel

Saját kutatásaik és külső felhasználók számára szolgáltatásként a HIPP konzorcium, valamint a Budapesti Neutron Centrum részeként üzemeltették az 5 MV-os EG-2R iongyorsítót, a NIK nehézion-implantert, a molekulanyaláb-epitaxia (MBE) berendezést valamint a GINA polarizált neutron-reflektométert. Kutatóik rendszeresen használják több nagy európai kutatási infrastruktúra mérőnyalábjaikat is.

Nem-rezonáns rugalmatlan röntgenszórással (NRIXS) a stuttgarti Max Planck Intézettel együttműködésben a 2–9 nm⁻¹ impulzusátadás-tartományban megmérték alkálifémek plazmon spektrumának nyomásfüggését 0 és 43 GPa között. A szabadelektronrázást talán legjobban

közelítő Na esetén is eltérést találtak a mért és a szabadelektron-gáz-modell szerinti nagynyomású viselkedésből jóslt értékek között. Az eredményeknek a DFT-számításokkal történt összevetése azt mutatja, hogy a növekvő nyomással a szabadelektron-gáz-viselkedéstől való növekvő eltérés oka nem az elektronkorreláció, vagy a kicserélődési kölcsönhatás változása, hanem az elektron-ion kölcsönhatás növekedése.

Tisztázva a reciprocitás és az időtükrözés, valamint a reciprocitás és a 180° -os forgatás kapcsolatát, a reciprocitás fogalmának a szóráselmélet fogalmi rendszerén alapuló új értelmezését adták. Mössbauer-szórási példákat adtak nem-reciprok- és reciprok-viselkedésre. Reciprocitás-tételük alkalmazásával magyarázatot adtak az úgynevezett diffúz ω -szkenek aszimmetriájára.

Az MTA TTK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézetének munkatársaival közösen eljárást dolgoztak ki nanoszerkezetek méretének, alakjának és összetételének meghatározására mm átmérőjű ionnyalábbal végzett Rutherford-visszaszórás segítségével. A technika alkalmazhatóságát SiO_2 nanogömbökön végzett kísérletekkel igazolták. Az úgynevezett nanogömb-litográfia alkalmazásával, azaz SiO_2 nanogömbök monorétegét besugárzó maszkként alkalmazva a merőleges mágneses anizotrópiájú FePd vékonyrétegben szabályos laterális mágneses mintázatot hoztak létre.

Ionbesugárzással eredményesen sikerült csökkenteniük neutrontükör-bevonatok belső feszültségét a neutronoptikai és polarizációs tulajdonságok jelentéktelen romlása mellett. Elméleti eredményeik alkalmazásaképpen új típusú neutron monokromátor, illetve sávszűrő rétegrendszereket dolgoztak ki, amelyek a közeljövőben partner vállalatnál ipari alkalmazásba kerülhetnek.

Polarizált neutron-reflektogramok alapján összehasonlították a Fe és a Co hatását a vele kontaktusban lévő szupravezető vanádiumban indukált mágneses réteg keletkezésében. A GINA reflektométerhez rádiófrekvenciás adiabatikus spinflippert fejlesztettek.

A CHARISMA EU FP7 kutatási program keretében német, osztrák, görög, román és olasz kutatók pályáztak sikerrel kulturális örökség részét képező tárgyak roncsolásmentes összetétel vizsgálatára az RMI Van de Graaff gyorsítójánál. A méréseket és az adatok kiértékelését az RMI munkatársai végezték, az eredményeket pedig együttesen értelmezték és tették közzé.

Elméleti fizika

A kutatók a részecske- és nehézion-fizika alapkérdéseivel, femtoszkópiái, holografikus térelméleti, relativitáselméleti, gravitációfizikai problémák megoldásával, komplex rendszerek multidiszciplináris kutatásával foglalkoznak.

Sikerült megmutatniuk, hogy két különböző diszperziós relációval rendelkező hullám kölcsönhatása sok fizikailag megvalósítható esetben arra vezet, hogy egy beérkező hullám a szórócentrumra nem a beérkezés irányával egyező, hanem avval ellentétes erőt fejt ki (negatív sugárzási nyomás ill. vonósugár effektus).

Az általános relativitáselmélet keretein belül definiálták a zárt univerzumok teljes tömegét, és megmutatták, hogy

I. ez a (nemnegatív) tömeg akkor és csakis akkor zérus, ha a téridő sík és a térszerű Cauchy felületei három dimenziós tóruszok,

II. ez a tömeg (numerikus együtthatótól eltekintve) épp a Sen-Witten operátor legkisebb sajátértéke,

III. Witten mérték feltétele akkor és csakis akkor róható ki, ha e tömeg zérus.

Javaslatot tettek egy alternatív, nem-triviális megoldásokkal mindig rendelkező mértékfeltételre.

Egy merőben új megfogalmazását adták a kvantum grupoidokat is magukba foglaló bialgebroidoknak, mely megfogalmazás egyben a jól ismert monoidális kategóriák általánosítását is magától kínálta.

A relativisztikus hidrodinamikát kísérleti részecskespektrumok kollektív viselkedésének kiszámítására alkalmazták. A hagyományos másodrendű Israel-Stewart módszert megkerülve kifejlesztettek egy elsőrendű, stabil elméleti leírást a disszipatív relativisztikus folyadékokra. Módszerükkel megmutatták a lineáris transzportegyütthatók, a viszkozitási és hővezetési együtthatók perturbációkat csillapító hatását. Ebben a módszerben az állapotegyenlet meghatározó lokális entrópia sűrűség olyan Lorentz-invariáns mennyiségek függvényeként adott, amelyek az energiaáram négyesvektorából vezethetők le. A Grad 14-momentum módszert kiterjesztették nem-extenzív Boltzmann-egyenletekre is, és ezzel egy q paraméter függő hidrodinamikai egyenletrendszer nyertek.

Korábbi eredményeikre alapozva, amelyek az általánosabb L -additivitás alapvető szerepét igazolták a termodinamika főtételeinek kielégítése terén, sikerült Tsallis és Rényi entrópia képletét levezetniük egy új alapelvől, amit hőtartály univerzalitási elvnek neveztek. Az elv alkalmazása megmutatja, hogy a statisztikus fizika Tsallis-Rényi-szerű általánosítása a mikrokanonikus ideális gáz eloszlásfüggvényével közelít exponenciális helyett.

A pion-nukleon ütközésekben történő elektron-positron párkeltés leírására kidolgoztak egy effektív térelméleti modellt. Megadták a folyamatban szerepet játszó alakfaktorok előírásának mértékinvariancia-őrző módját. A modell alapján numerikus jóslatokat adtak a HADES együttműködés (GSI, Darmstadt) által tervezett mérésekhez. A témában írt publikáció a Phys. Rev. C-ben kiemelt helyen (editor's suggestion-ként) jelent meg.

A η' tömegének sűrű anyagban történő változását vizsgálva a Witten-Veneziano egyenletből levezették ennek a tömegnek a hőmérséklet függését.

A PHENIX kísérletben megmérték a nukleáris módosulási faktor gerjesztési függvényét 39 GeV-től 200 GeV-es energiáig. Az eredmények oly módon értelmezhetők, hogy a QCD kritikus pontja, amennyiben ez a pont létezik, biztosan a 40 GeV tömegközépponti ütközési energia alatt található. Ezen energia felett a RHIC nehézion-ütközéseiben mért elliptikus folyási paraméter (v_2) skálatulajdonságokat mutat, legalábbis a lágy folyamatok tartományában, ami arra utal, hogy a tökéletes folyadék-kép 40 GeV-es ütközési energiától egészen az LHC 7-8 TeV-es energiájáig érvényben marad.

Megmutatták, hogy a forgó Kerr-feketelyuk téridőn a szuperradiancia a várakozásokkal ellentétben sokkal kisebb energiatermelésre képes, szuperradiancia helyett a szuperradianciára hangolt hullámcsomagoknak egy majdnem tökéletes visszaverődése játszódik le.

Maldacena sejtését felhasználva formulákat származtattak operátorok anomális dimenziójának perturbatív számolására. A legegyszerűbb nem-triviális (Konishi) operátor esetén az anomális dimenziót a perturbáció számítás hét hurok rendjéig bezárólag végezték el a számítást. Ezen

eredmények összevethetőek a mértékelméleti számolásokkal, így lehetőséget teremtenek a sejtés alátámasztására.

Megmutatták, hogy a szabadalmi hivatkozási hálózatból információ nyerhető a technológiai struktúra változásáról. A hálózat egy alosztályát klaszterezési eljárással vizsgálva kimutatták egy új osztály kiválását a hivatalos csoportosítás előtt.

Az agy hippokampusz részén mikroelektróda rendszerekkel rögzített elektromos adatok elemzésével először demonstrálták egyetlen idegsejt bemeneti áramainak térbeli eloszlásában megfigyelhető különbséget különböző agyi állapotok között.

Plazmafizika és hűtött atomok fizikája

Kifejezetten a Wendelstein 7-X (W7-X) sztellarátor kamerás megfigyelőrendszeréhez kifejlesztették az EDICAM (Event Detection Intelligent CAMera) nevű különleges kamerát. A W7-X nehezen hozzáférhető tangenciális portjában lévő elhelyezési nehézségek és mágneses zavarok elkerülése érdekében kisméretűre tervezett és erős, akár 2,5 T változó mágneses tereknek is ellenálló kamera két részből, a kisméretű szenzor modulból (SM) és a képfeldolgozó- és vezérlő egységből (Image Processing and Control Unit, IPCU) áll. A sztellarátor divertor területének jobb megfigyelésére az eredeti kamera kialakítás mellé egy második, módosított elrendezésű változatot is kifejlesztettek. Az összeszerelt kamerákon végzett sikeres tesztek rámutattak azokra a területekre, ahol további fejlesztések szükségesek. A W7-X kamerás megfigyelőrendszere 2013-ban lesz teljesen működőképes.

A Budapesti Műszaki Egyetemen együttműködésben elkészültek a végeleges nyaláb-emissziós spektroszkópia (NyES) diagnosztika megfigyelő rendszerének tervei is. Ezt a nagyérzékenységű kamerát a Wigner FK hasznosító vállalkozása az Adimtech Kft. fejlesztette ki. Az optikai elrendezésben egy CCD kamera is helyet kapott, ami kalibrációs célok mellett a teljes fűtőnyaláb intenzitás profilját is méri.

A koreai KSTAR tokamak NyES rendszere az év nyarán épült meg a Wigner FK optikai laborjában és szeptemberben már beszerelésre is került. Az első mérések megfeleltek az előzetes várakozásoknak. Az adatfeldolgozás szempontjából legfontosabb mérőszám a rendszer jel-zaj viszonya kiváló, eléri a 100-as értéket is.

A hűtött atomok fizikájának témakörében megmutatták, hogy hogyan lehet megjeleníteni az atomok belső dinamikáját magneto-optikai csapdába (MOT) zárt, hűtött atomcsomag rövid lézerimpulzusokkal történő koherens gyorsításával. Kísérletileg bebizonyították, hogy a lézerimpulzusokkal indukált populáció-átvitel dinamikája tükröződik az impulzus-lézer teréből az atomi sokaságnak átvitt mechanikai momentum mértékében. Hűtött és csapdázott rubídium atomok gyorsulását vizsgálták egymással szemben haladó rövid lézer impulzusok terében, amelyeknek a frekvenciája meghatározott módon változott. Az optikai rezonátorral kapcsolatos kutatásaik során megmutatták, hogy az atomok előkészített koherens szuperpozíciós állapota kvalitatívan megjeleníthető kétdimenziós mintázatban aszerint, hogy hogyan térülnek el két, egymást keresztező állóhullámon.

A lézerplazma vizsgálatok terén az év legfontosabb eredménye a Wigner FK ELI lézertudományi laboratóriumának beindítása volt. Az év során beszerzett új lézerhez egy kölcsönhatási kamrát építettek, amelyben gázokban keltett magas harmonikusok tanulmányozását kezdték el. Az első eredmények azt mutatták, hogy a 35 fs impulzushosszú lézerrel a Ti-zafir lézer

harmonikusait egészen a 35. rendig sikerült kelteni gázjet targeten, így Magyarországon először sikerült előállítani attoszekundumos impulzussorozatot.

Űrfizika és űrtechnika

A Nap mágneses terének egy része belefagy a napszélbe és kiterjed a bolygóközi térbe. A mágneses fluxus a helioszférában legjobban az űrszondák által mért mágneses térerősségvektor radiális komponensével jellemezhető, amely bonyolult módon függ a megfigyelés helyétől és idejétől. Az intézet kutatói megmutatták, hogy ez a komplexitás főként magnetohidrodinamikai hullámoknak tulajdonítható és új adatfeldolgozási módszert vezettek be, amely nagymértékben redukálja a fluktuációk hatását. Ez új lehetőségeket nyitott meg a szoláris mágneses tér napfoltciklus szerinti változásának kutatásában.

Az energikus ionokkal szemben, melyek főként a Naptól érkeznek, a ~ 1 MeV-nél nagyobb energiájú elektronok fő forrása a Jupiter bolygó. Föld közeli elektron mérések alapján megmutatták, hogy a 2007–2008-ban észlelt periodikus változások megmagyarázhatók hosszú ideig fennálló, a Nappal együtt forgó, elektronokat tartalmazó mágneses csapdákkal. A nyugodt időszakokban észlelt 0,03-1 MeV/n energiájú ionok elemzéséből kimutatták, hogy az ionok elemi összetétele három jól elkülönülő csoportra bomlik. Ezek rendre a szoláris energikus részecske eseményeknek, a napkoronának, illetve a napszélnek felelnek meg és arra utalnak, hogy a különböző csoportokban más és más gyorsítási mechanizmusok működnek.

Helyszíni mérések szerint a Szaturnusznál létezik egy mágneses lemeznek nevezett komplex mágneses/plazma struktúra, amit a bolygó mágneses tere és a bolygót körülvevő együttlépcsős plazma kölcsönhatása hoz létre. A magnetoszféra plazmájának összetétele és sűrűsége, továbbá a mágneses tér is erősen függ a mérés helyének a mágneses lemezhez viszonyított relatív helyzetétől. A Cassini Plasma Spectrometer méréseiből levezetett ionsűrűségek felhasználásával a kutatók meghatározták a mágneses lemez helyzetét a Szaturnusz magnetoszférajának éjszakai oldalán a napéjegyenlőség körüli időszakban.

A Titán a Szaturnusz legnagyobb holdja, amely naprendszerünkben egyedülálló módon sűrű atmoszférával is rendelkezik. De mivel mérhető saját mágneses tere nincs, a magnetoszférikus eredetű, nagy energiájú töltött részecskeáramlás folyamatosan bombázza ezt az atmoszférát. Az intézet kutatói a nagy energiájú elektronok és a Titán felső atmoszférájának kölcsönhatását vizsgálva azt találták, hogy a nagy energiájú elektronok változatos magasságokban tűnnek el a plazmaáramlásból, de a folyamat leginkább az exo-ionoszféra és az ionoszféra magasságában kezdődik.

Modellszámításokkal megmutatták, hogy a Nap közelében keletkező nano-méretű porszemcsék elektromos töltésre tesznek szert és kölcsönhatnak a bolygóközi elektromos térrel, aminek következtében a nanopor nagy sebességre (300 km/s) gyorsul és térbeni eloszlása azimutálisan aszimmetrikus lesz a Föld pályájának környezetében. Eredményük jó egyezést mutat a STEREO A és B űrszondák méréseivel.

A Merkúr kutatására induló BepiColombo űrszonda SERENA/PICAM ion kamera minősítő példányához elkészítették azt a tápegységet, amely nemcsak az elektronika működéséhez szükséges fix feszültségeket szolgáltatja, hanem az ion detektor rácsának feszültségét is biztosítja. Az utóbbi feszültségnek változtathatónak kell lennie, hogy az ionok energia szerinti szelektív mérését is el lehessen végezni a Merkúr környezetében.

A kutatócsoportjuk közreműködésével készült Rosetta Philae leszállóegység központi számítógépének szoftver karbantartása során a földi referencia modellen végzett tesztek adatainak ismeretében néhány kisebb működési módosítást végrehajtó parancs sorozatot készítettek elő a 2011-ben hibernált állapotból 2014-ben tervezett „ébresztés” utáni szoftverfrissítésre.

Informatika, e-tudomány (e-science)

Az év során megtörtént a központi login, levelezés és web szolgáltatások GFS clusterről egy tartalékolt SAN/NAS storage rendszer köré épített virtualizált clusterre való migrálása. Több háttér kiszolgáló fizikai szervert a virtualizált környezetbe emeltek át. A storage rendszer adatainak rendszeres mentésére a lebontott GFS cluster tárolóit újra felhasználták.

Az SzHK az MTA intézethálózatának átszervezése során az MTA Energiatudományi Kutatóközpontba került Izotópkutató Intézet felhasználóit, és azok levelezésének kezelését az MTA EK kérésének megfelelően sikeresen migrálta a központi szervereire.

Az RMI BUDAPEST grid állomás az év folyamán 99% fölötti megbízhatósággal (rendelkezésre állással és elérhetőséggel) működött. Ezzel az állomás a közel száz hasonló Tier-2 központ között egyike volt a legeredményesebbeknek, a CMS kollaborációban érintett ötven központ közül pedig az első helyen szerepelt.

Az RMI grid állomás részt vett az EU FP-7 EGI-InSPIRE projektjében, és ennek keretében a magyar Nemzeti Grid Iniciatíva (NGI) működtetésében. A magyar NGI erőforrásainak túlnyomó részét, az összes központi szolgáltatást, továbbá az operatív feladatokat és a technikai koordinációt az RMI grid csoportja nyújtotta.

Kibővítették a BraiLab Text-to-Speech rendszert, hogy az a szintetizált beszéddel szinkronizálva felvett hangikonokat is le tudjon játszani, és a Windows operációs rendszeren működő ingyenes NVDA (Non Visual Desktop Access) nevű képernyőolvasó programmal használható legyen. A BraiLabnak ezt a változatát átadták az NVDA honosítóinak.

A Windows alatt már működő Talkpad programjukat android operációs rendszer alá helyezték át, hogy táblagépekkel segíthessék a támogatott kommunikációval kommunikálni tudó autista gyermekeket. A program használatát egy római katolikus iskolában súlyosan autista gyerekeket tanító gyógypedagógus csoport segítségével tesztelték.

Részt vettek az ICCHP (International Conference on Computers Helping People with Special Needs) konferencia program bizottságának munkájában.

b) Tudomány és társadalom

Az RMI kutatói tevékenyen részt vettek a középiskolai és felsőoktatásban. Rendszeres egyetemi előadásai mellett 2012-ben is megszervezték az RMI-ben a CERN-központú nemzetközi részecskefizikai diákműhelyt középiskolásoknak és a középiskolai fizikatanárok továbbképzését a CERN-ben. A nagy érdeklődésre való tekintettel ebben az évben is szerveztek még egy további egynapos diákműhelyt. Az intézet Detektor laboratóriumában heti rendszerességgel kísérleti foglalkozást tartottak középiskolásoknak, esetenként videokonferenciás beszélgetést biztosítva a diákok számára a CERN-ben dolgozó magyar fizikusokkal. Számos ismeretterjesztő cikket írtak és előadást tartottak fizikatanári ankétokon

és középiskolákban. Magyarország 20-éves CERN-tagsága alkalmából nagyszerű akadémiai ülést szerveztek 2012 októberében és vendégszerkesztői voltak a magyar CERN-tevékenységnek szentelt Fizikai Szemle különszámnak.

Számos előadást tartottak hazai középiskolákban, illetve az általuk szervezett természettudományos önképzőkörökben (Fazekas Mihály Gimnázium, Veres Pálné Gimnázium). Az intézet egyik munkatársa az általa az elmúlt évben kezdeményezett Magyar Természettudományos Önképzőköri Mozgalom keretében foglalkozott középiskolás diákokkal Gyöngyösön, Egerben és Hódmezővásárhelyen, és részt vett két nyári tábor szervezésében is.

Az intézet kutatóival 2012-ben is egy sor interjút készítettek kutatásaikkal kapcsolatban, ide értve magyar tudományos és ismeretterjesztő szaklapokat, hírportálokat, az MTV, az MR és az Info Rádió különböző műsorait, valamint olyan külföldi médiumokat is, mint például a CERN Courier. Ebben az évben a Higgs bozonnal kapcsolatos fejlemények váltották ki a legnagyobb érdeklődést.

Az RMI munkatársai részt vettek a Szegeden, 2012 májusában nyolcadik alkalommal megrendezett Mars Rover Verseny szervezésében és sikeres lebonyolításában. Ez a vetélkedő jelentős alkalom az űrkutatás népszerűsítésére, amelynek sikeres versenyzői általában az űrkutatás elkötelezettjeivé válnak. A versenyt az érdeklődők élőben követhették az interneten keresztül, a közvetítés archivált változata jelenleg is elérhető. Az eseményről számos hazai és nemzetközi híradás jelent meg.

2012-ben már nyolcadszor rendezték meg az intézet legújabb tudományos eredményeiről közérthető nyelven áttekintést adó Simonyi Napot. Megkoszorúzták Simonyi Károly professzor éppen 10 évvel ezelőtt állított emléktábláját. Leleplezték a hajdani MT-M1 tokamak szabadtéri szoborként elhelyezett vákuum kamráját, megemlékezve arról, hogy Simonyi Károly a termonukleáris fúzió kutatásában is úttörő szerepet vállalt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Mivel 2012. január elsejével a korábbi MTA KFKI RMKI az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont intézete lett, így a korábbi intézményes két- és többoldalú tudományos kapcsolatok formálisan már a Wigner FK kapcsolatai. Az alább felsorolt RMI intézeti kapcsolatoknak nevezett kapcsolatokat ennek a ténynek megfelelően kell érteni.

Hazai kapcsolatok

Az RMI aktív szakmai kapcsolatot tart fenn számos MTA kutatóközponttal, kutatóintézettel, elsősorban a KFKI Telephely kutatóintézeteivel, valamint az ATOMKI-val. Mágneses rétegszerkezetek vizsgálata terén Wigner FK több kutatócsoportja, az MTA TTK, az MTA ATOMKI, valamint a DE Szilárdtestfizika Tsz működött együtt. Több neutronoptikai fejlesztési témában együttműködés volt a Mirrotron Kft.-vel és az amorf Si hidrogéntartalmának meghatározásával megkezdtek az együttműködést a Green Solar céggel, mint lehetséges jövőbeli ipari partnerrel.

A Wigner FK az MTA EK-val együtt alkotja a Budapest Neutron Center konzorciumot és a CHARISMA (Cultural Heritage Advanced Research Infrastructures: Synergy for a Multidisciplinary Approach to Conservation/Restoration) EU FP7 projekt egyik FIXLAB

platformját, amelynek sokoldalúságát az RMI a 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 RMI aktív munkakapcsolatokat tart fenn a TTK, a SZTAKI, a CSFK Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet és az SZBK kutatóival is. A Wigner FK SzHK az NIIF program regionális központja. A részecskefizikai intézmények, a CERN, a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium (USA) és a GSI (Németország), nagy nemzetközi projektjeiben az RMI mellett részt vesznek az ATOMKI, a Debreceni Egyetem Kísérleti Fizikai Tanszéke, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Atomfizikai Tanszéke kutatói is. Valamennyi részt vevő magyar csoportot az RMI kutatói vezetik. A grid-technológia fejlesztése terén együttműködnek a Magyar Grid Kompetencia Központ (MGKK) tagintézményeivel (BME, ELTE, NIIF és SZTAKI), 2012-ben magát az MGKK működését is az RMI koordinálta.

Az RMI egy-egy munkatársa az elnöke a széles magyar tudományosság számára elérhető Nemzetközi Elméleti Fizikai Műhelynek (NEFIM) és a Szinkrotron Bizottságnak. Ezen testületek adminisztratív és pénzügyi feladatait is a Wigner FK látja el.

Az RMI számos munkatársa tisztségviselője vagy tagja különféle akadémiai bizottságoknak és testületeknek, NIH-bizottságoknak, az Eötvös Loránd Fizikai Társulatnak, különböző szakmai kuratóriumoknak, a hazai úrkutatás irányító testületeinek, stb.

Felsőoktatás

Az intézeti kutatócsoportok utánpótlásának biztosítása érdekében az RMI 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 RMI különösen szoros kapcsolatot ápol az ELTE-n folyó fizikus- és a BME-n folyó mérnök-fizikusképzéssel, valamint a debreceni, a szegedi és a pécsi egyetemek fizikai intézeteiben folyó oktatással. RMI-munkatárs oktatja a Biofizika és Biophysics kötelező tárgyakat a SZIE AOTK-n és ők tartanak előadásokat az SE-n is. 2012-ben majd 1500 órányi tananyagot adtak át a kurzusra bejelentkező diákoknak, valamint egy sor rendes, illetve emelt szintű laborgyakorlatot vezettek. A különböző Doktori Iskolákban 20 RMI-kutató tevékenykedett PhD-témavezetőként. 2012-ben az RMI-ben 8 MSc-szakdolgozat készült és 3 PhD-dolgozat megvédésére került sor. Jelenleg 6 egyetemről 25 doktoranduszhallgató készíti PhD-dolgozatát intézeti témavezetéssel (15 ELTE-, 4 BME-, 2 SE-, 2 PTE- és 1-1 PPKE- és SZTE-hallgató). A kutatók részt vesznek az egyetemi bizottságok munkájában. 2012-ben két RMI kutató szerezte meg az MTA Doktora címet.

Nemzetközi kapcsolatok

Az RMI-ban szinte valamennyi kutatás nemzetközi együttműködés keretében folyik, a legfontosabb szálak a CERN-hez, az ESA-hoz és az EURATOM-hoz kapcsolódnak, továbbá az RMI a koordinátora a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium (USA) Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjénél (RHIC) az ELTE és a Debreceni Egyetem részvételével működő PHENIX-MAGYARORSZÁG kísérleti együttműködésnek is. Külön kiemelendő, hogy az LHC CMS

együttműködésben a QCD munkacsoportnak RMI kutató a társ-koordinátora. Az RMI kutatói aktívan részt vesznek a gravitációs hullámokat mérő olaszországi VIRGO kísérletben.

A kutatásban partner intézmények száma a százat is meghaladja, közöttük a megfelelő szakterület legnevesebb intézményei is szerepelnek. Még a fontosabb kapcsolatok felsorolása is messze meghaladná a beszámoló kereteit. Néhány kapcsolat a teljesség igénye nélkül: egy kutató vendégprofesszor volt a Tours-i Egyetemen, egy másik egész évben a Cambridge-i Egyetem Computational and Biological Learning Laboratóriumában dolgozott Marie-Curie Ösztöndíjjal. Intenzív közös kutatómunka folyt a Frankfurti Egyetem kutatóival, vendégkutatót fogadott az intézetből a Rutgers Egyetem is. A komplex rendszerek kutatása területén folytatódott az aktív, professzor- és hallgatócserét is magában foglaló együttműködés a Kalamazoo College (Michigan University, USA) kutatóival.

Az RMI kutatói fontos szerepet kapnak a külföldi, elsősorban európai nagyberendezések (szinkrotronok, iongyorsítók, neutronforrások, tokamakok, sztellarátorok) mellett végzett, vagy azok létrehozására irányuló (pl. ITER, ELI) kutatásban. A nukleáris anyagtudomány témában az RMI munkatársai közös nyilatkozó-pályázatokat nyújtottak be és közös kísérleteket folytattak a European XFEL, a Koppenhágai Műszaki Egyetem, a Lundi Egyetem, az Argonne National Laboratory és a Hannoveri Leibniz Egyetem csoportjaival. Kétoldalú projektet kezdtek a Pierre and Marie Curie University – Paris 6 kutatóival. Igen jelentős szerepet játszik az a nagyszámú egyéb kutatóhely is, melyekkel bilaterális vagy multilaterális kapcsolatokon keresztül folyik együttműködés. A Wigner FK RMI a magyar fúziós programot a Magyar EURATOM Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálja és a többi magyar intézmény (EK, Széchenyi Egyetem, ATOMKI, BME, ELTE, Dunaújvárosi Főiskola) az RMI közvetítésével vesz részt ebben a munkában. Az RMI 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. A tavaly létrehozott Koreai – Magyar Fúziós Közös Laboratórium munkája a terveknek megfelelően, eredményesen folyt, koreai vendég kutatók több hetet dolgoztak a laboratóriumban. Egy mérnök munkatárs 2012 őszén kezdte meg négyéves kiküldetését a Európai Fúziós Szervezet (EFDA) garchingi központjában.

Az RMI kutatói működtetik a Cluster Magyar Adatközpontot, amely pálya- és egyéb kiegészítő adatokat szolgáltat az ESA (Európai Űrügynökség) négy, azonos műszerezettségű Cluster műholdjának tudományos adatrendszerébe.

Az RMI kutatói részt vettek az International Space Science Institute (Bern, Svájc) által rendezett „The Plasma environment of Venus, Mars, and Titan” című workshop szervezésében.

2012-ben tizenegyedszer rendezték meg a „Zimányi Winter School on Heavy Ion Physics” nehézion-fizikai iskolát, amely a kutatási terület egyik elismert, fontos nemzetközi rendezvénye.

Az RMI kutatói aktív résztvevői a nemzetközi tudományos közéletnek is. Azon hosszú távú feladattal rendelkező testületek közül, melyekben az RMI kutatói képviselik a magyar érdekeket, a legfontosabbak a CERN Tanácsa és bizottságai, a NUPECC bizottság, 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), az 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 European Neural Network Society Executive Committee, a EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication), a Linux kernel Netfilter/IPtables komponensének fejlesztését végző nemzetközi munkacsoport.

Az RMI 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 RMI kutatóinak elismertségét nemcsak a számos konferencia-előadásra szóló meghívás jelzi, hanem a rangos nemzetközi bíráló-bizottsági részvételre szóló ismételt felkérések is.

2012-ben másodszor ítélték oda az RMKI alapította a „Zimányi Medal on Nuclear Theory” érmet, amelyet a Quark Matter 2012 konferencián nyújtottak át a felkért nemzetközi bizottság által kiválasztott fiatal tudósnak. A Varga Imre szobrászművész által készített éremhez a Zimányi család pénzjutalmat társított.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az RMI-ben folyó kutatások anyagi fedezetét az MTA költségvetési támogatása és a korábban elnyert külső források nyújtották 2012-ben is. Ez utóbbiak nagysága erőteljesen csökkent, mivel 2012-ben sem került sor érdemben hozzáférhető hazai K+F pályázatok kiírására. Új forrásként jelentek meg az MTA különböző infrastruktúra fejlesztési és gépműszer felújítási pályázata, melyeken közvetlenül az RMI mintegy 60 M Ft támogatást nyert.

Ebben az évben két olyan MTA Lendület pályázat is volt, amelynek nyertese az RMI-ben alakított kutatócsoportot. Kutatóik 5 OTKA-pályázatot nyertek el, a teljes futamidőre számítva 257 M Ft támogatási összeggel.

A nemzetközi pályázatok között két kiemelkedő sikert hozott az év. Egyedülálló siker, hogy a 2011-ben még az MTA KFKI RMKI által kezdeményezett, de már a Wigner FK által benyújtott pályázat erős nemzetközi mezőnyben megnyerte a CERN Tier-0 adatközpont létrehozására kiírt nemzetközi tendert. A kutatóközpont a szerződésben vállalt időarányos kötelezettségeit a rendkívül szoros határidő ellenére pontosan teljesítette.

A 4 évre szóló, mintegy 3,7 millió eurós ösztámogatású Fusion for Energy, F4E-FPA-328, szerződés célja az ITER tokamak diagnosztikai érzékelőiben (pl. mágneses optikai stb.) keletkezett elektromos mérési jelek továbbításával és kiszolgálásával kapcsolatos kutatás-fejlesztési tevékenységek ellátása.

A CHARISMA EU FP7 projektben, amelyben a lehívható pénz a tényleges mérési napok számának függvénye, jelentősen nőtt az RMI nyújtotta ion-nyaláb mérési lehetőséget is igénybevevő sikeres külföldi pályázók száma, és ezzel arányosan a beérkező pénzügyi támogatás.

TÉT pályázatokon „Kapcsolható vaskomplexek vizsgálata nagyfelbontású röntgenspektroszkópiával, kombinált kísérleti és elméleti megközelítésben” címmel kétéves magyar–francia, „Porózus anyagok és maradékfeszültség vizsgálata fémekben nukleáris spektroszkópiákkal” témában pedig szintén kétéves magyar–vietnami együttműködéshez nyertek támogatást. „Multiscale thermomechanics of complex systems” címmel közös kutatómunka kezdődött az MTA és az Észt Tudományos Akadémia közötti együttműködési megállapodás keretében.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szabados BL: Mass, gauge conditions and spectral properties of the Sen-Witten and 3-surface twistor operators in closed universes. *Classical and Quantum Gravity*, 29: 090501 (30pp), arXiv:1112.2966 (2012)
2. Szlachányi K: Skew-monoidal categories and bialgebroids. *Advances in Mathematics*, 231: 1694 (2012)
3. Zétényi M and Wolf Gy: Dilepton production in pion-nucleon collisions in an effective field theory approach. *Phys. Rev. C*, 86: 065209 (2012)
4. Kwon Y, Lee SH, Morita K, Wolf Gy: A renewed look at eta' in medium. *Phys. Rev. D*, 86: 034014 (2012)
5. Ván P, Biró TS: First order and stable relativistic dissipative hydrodynamics. *Phys. Lett. B*, 709: 106 (2012)
6. Adare A, ..., Csörgő T... et al (PHENIX Collaboration). Evolution of pi0 suppression in Au+Au collisions from $\sqrt{s(NN)}=39$ to 200 GeV. *Phys. Rev. Lett*, 109: 152301 (2012)
7. Bottyán L, Merkel DG, Nagy B and Major J: Neutron Reflectometer with Polarization Option at the Budapest Neutron Centre. *Neutron News*, 23: 21-24 (2012)
8. Deák L, Fülöp T: *Annals of Physics*, 327: 1050-1077 (2012)
9. Deák L, Bottyán L, Fülöp T, Kertész G, Nagy DL, Ruffer R, Spiering H, Tanczikó F, and Vankó G: Switching Reciprocity On and Off in a Magneto-Optical X-Ray Scattering Experiment Using Nuclear Resonance of α -57Fe Foils. *Phys. Rev. Lett*, 109: 237402 (2012)
10. Balogh J, Bujdosó L, Kaptás D, Dézsi I, Nakanishi A: Top and bottom interfaces in Fe-B multilayers investigated by Mössbauer spectroscopy. *Phys. Rev. B*, 85: 195429 (2012)
11. Abovyan GA, Djotyan GP, and Kryuchkyan Gagik Yu: Visualization of superposition states and Raman processes with two-dimensional atomic deflection. *Phys. Rev. A*, 85: 013846 (2012)
12. Lalouis P, Földes IB, Hora H: Ultrahigh acceleration of plasma by picosecond terawatt laser pulses for fast ignition of fusion; *Laser and Particle Beams*, 30: 233-242 (2012)
13. Nam YU, Zoletnik S, Lampert M, Kovácsik Á: Analysis of edge density fluctuation measured by trial KSTAR beam emission spectroscopy system. *Rev Sci Instrum*, 83: 10D531/1-3 (2012)
14. Guszejnov D, Pokol GI, Pusztai I, Refy D, Zoletnik S, Lampert M, Nam YU: Three-dimensional modeling of beam emission spectroscopy measurements in fusion plasmas. *Rev Sci Instrum*, 83: 113501/1-7 (2012)
15. Sándor N, Bakos JS, Sörlei Zs and Djotyan GP: Creation of coherent superpositions between metastable atomic states in Doppler-broadened media. *J. Phys. Conf. Ser.*, 35001 (2012)
16. Demeter G, Kis Z, Hohenester U: Nonlinear pulse propagation phenomena in ion-doped dielectric crystals. *Phys. Rev. A*, 85: 033819 (2012)
17. Bebesi Z, Krupp N, Szegő K, Fränz M, Németh Z, Krimigis SM, Mitchell DG, Erdős G, Young DT, Dougherty MK: Analysis of energetic electron drop-outs in the upper

- atmosphere of Titan during flybys in the dayside magnetosphere of Saturn. *Icarus*, 218: 1020-1027 (2012)
18. Erdős G, Balogh A: Magnetic flux density measured in fast and slow solar wind streams. *Astrophys J*, 753: 130 (2012)
 19. Szegő K, Németh Z, Erdős G, Földy L, Bebesi Z, Thomsen M, Delapp D: Location of the magnetodisk in the nightside outer magnetosphere of Saturn near equinox based on ion densities: *J Geophys Res*, 117: A09225/1-11 (2012)
 20. Abelev B, ..., Agócs A, Barnaföldi GG, Bencédi Gy, Boldizsár L, Dénes E, Hamar G, Lévai P, Molnár L, Pochybova LS ... et al.: Measurement of Event Background Fluctuations for Charged Particle Jet Reconstruction in Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$ TeV. *J. High Energy Physics*, 1203: 053 (2012)
 21. Aad G, ..., Tóth J, Pásztor G et al.: Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC. *Phys. Lett. B*, 716: 1–29 (2012)
 22. Chatrchyan S, ..., Aranyi A, Bencze Gy, Boldizsár L, Debreczeni G, Hajdu Cs, Horváth D, Kapusi A, Krajczár K, László A, Siklér F, Vesztergombi Gy, Veszprémi V et al. : Observation of a new boson at a mass of 125 GeV with the CMS experiment at the LHC. *Phys. Lett. B*, 716: 30–61 (2012)
 23. Reisdorf W, ..., Fodor Z, Kecskeméti J, Seres Z et al.: Systematics of azimuthal asymmetries in heavy ion collisions in the 1 A GeV regime. *Nucl. Phys. A*, 876: 1–60 (2012)
 24. Barnaföldi GG, Hamar G, Melegh HG, Oláh L, Surányi G, and Varga D: Portable cosmic muon telescope for environmental applications. *Nucl. Instrum. Meth*, 689: 60–69 (2012)
 25. Abbiendi G, ..., Csilling Á, Hajdu Cs, Horváth D, Pásztor G, Vértési R et al: OPAL Collaboration. Search for Charged Higgs Bosons in e^+e^- Collisions at $\sqrt{s} = 189$ -209 GeV. *Eur. Phys. J. C*, 72: 2076 (2012)
 26. Abgrall N..., Boldizsár L, Fodor Z, Fülöp A, László A, Pálla G, Vesztergombi Gy et al: Measurement of production properties of positively charged Kaons in proton-carbon interaction at 31 GeV/c. *Phys. Rev. D*, 85: 035210 (2012)

MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT

SZILÁRDTEST-FIZIKAI ÉS OPTIKAI INTÉZET

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

telefon: (1) 392 2217; fax: (1) 392 2768

e-mail: szfi@wigner.mta.hu; honlap <http://wigner.mta.hu/>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Felfedező kutatások végzése a kondenzált anyagok fizikája, az elméleti és matematikai fizika, a hűtött atomok fizikája, a komplex rendszerek, valamint a lágy anyagok fizikája, a nanoszerkezetek, a vékonyrétegek és felületek fizikája, a neutronfizika, a fémfizika, az optikai kristályok fizikája, a kvantumoptika és lézerfizika egyes területein. Alkalmazott kutatások végzése a felfedező kutatásokhoz csatlakozó területeken, kiemelt feladatnak tekintve új anyagok előállítását, minősítését és vizsgálatát, új anyagvizsgálati módszerek fejlesztését, új optikai kristályok, új vékonyréteg eszközök és új lézerek előállítását és alkalmazását. Fejlesztési tevékenység végzése a felfedező és alkalmazott kutatásokhoz csatlakozó területeken, kiemelt feladatnak tekintve a nanotechnológia, a lézertechnika, a spektroszkópia, a kristályfizika területét, speciális elektronikus és mechanikus eszközök fejlesztését, a kristálynövesztési technológiák fejlesztését, a szoftverfejlesztést, valamint új optikai mérés-technikai módszerek és eszközök fejlesztését. Működtetési tevékenység végzése az intézet területén található és felügyeletére bízott nagyberendezéseknél, amelybe beletartoznak ultravákuum-berendezések, neutronnyaláb-kutatási eszközök, lézerek, számítógépek, számítógép hálózatok, valamint a hélium cseppfolyósító.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Elméleti szilárdtest-fizikai kutatások

Erősen korrelált rendszerek. – Az elmúlt néhány évben az ultrahideg atom- és molekularendszerek vizsgálata mind a kísérleti, mind az elméleti érdeklődés fókuszába került, ami nem utolsósorban annak köszönhető, hogy ezek a rendszerek jól alkalmazhatók a kondenzált anyagok fizikájának tanulmányozására is. Hosszú ideig úgy képzelték, hogy a mágneses rendeződés és a szupravezetés jelensége kizárja egymást. Valóban, szinglett Cooper-párok homogén szupravezető rendje kizárja a homogén ferromágneses rendeződést. Megmutatták, hogy $F=3/2$ hiperfinom spinnel rendelkező ultrahideg atomok rendszere, melyet leíró modell csak s-hullámú szórást tartalmaz, egynegyed betöltöttség mellett instabil lehet kvintett párok kialakulásával szemben, amennyiben a kvintett csatornában vonzó a kölcsönhatás. Nagy pontosságú sűrűségmátrix renormálási csoport módszerrel meghatározták a korrelációs függvényeket és megállapították, hogy a különböző kvintett párok kvázi-hosszútávon korrelálttá válhatnak, ha a rendszer részlegesen polarizált. Ennek megfelelően különböző kevert, kvintett szuperfolyékony fázisok alakulnak ki, melyekben több, különböző mágneses momentummal rendelkező Cooper-pár van jelen.

Komplex rendszerek. – A rendezetlen transzverz Ising modell összefonódási entrópiáját az aszimptotikusan egzakt eredményre vezető erős rendezetlenségi renormálási csoport módszerrel numerikusan kiszámolták, 2-, 3- és 4-dimenziós hiperkübös rácsokon az alrendszer különböző alakjai esetén. A felületi törvényt minden esetben érvényesnek találták, de ahhoz az E-dimenziós élekből ($1 \leq E \leq d-2$) analitikus járulékok adódnak. A sarkokból

származó korrekciók a kritikus pontban logaritmikusan divergensnek adódtak, melynek előfaktora adott dimenzió esetén univerzális, azaz független a rendezetlenség alakjától.

Elektronállapotok fémekben. – A paramágneses, tércentrált köbös (bcc) és lapcentrált köbös (fcc) szerkezetű Fe-M (M = Al, Si, V, Cr, Mn, Co, Ni, és Rh) szilárd oldatok rugalmassági tulajdonságait vizsgálták az exact muffin-tin-pálya módszer segítségével a koherens potenciál közelítésben, az úgynevezett „rendezetlen lokális momentum” modellben (DLM). Azt találták, hogy a szennyező anyagok vagy helyben hagyják vagy növelik a paramágneses vas egyensúlyi térfogatát. Ugyanakkor a rugalmassági paraméterekben mind pozitív, mind negatív irányú változást is kiváltak. Néhány ötvözőelem ráadásul ellenkező előjelű változást okoz a paramágneses bcc és az fcc szerkezetben a nyírási paraméterekben. Úgy találták, hogy kevés kivételtől eltekintve, az ötvözés lényegesen kisebb mértékben érinti a bcc paramágneses vasat, mint az fcc szerkezetűt. A tetragonális rugalmas állandó viselkedése az ötvözőelemek hatására nagymérvű korrelációt mutat a számolt fcc-bcc rácsenergia különbségekkel. A fenomenologikus Landau elmélet és *ab initio* számítások segítségével rávilágítottak a metamágnesség mibenlétére és a rendeződési hőmérsékletnek az adalékolástól való szokatlanul erős függésére Fe₂P ötvözetekben. Megmutatták, hogy a mágnesezettség a kétféle vas alrácson olyan módon csatolódik össze, ami nagyon erősen függ az ötvözéstől. Megmutatták azt is, hogy az ezekben a gyakorlati alkalmazások számára rendkívül fontos anyagokban a kísérletileg megfigyelt rendeződési hőmérsékleteket csak olyan számításokkal lehet megkapni, ahol a DLM modellt Monte-Carlo számításokkal kombinálták.

Félvezető nanoszerkezetek. – Elméleti és kísérleti kutatásokat végeztek a szilíciumkarbid (SiC) nanoszemcsék biológiai jelzőrendszer alkalmazásaiban. A kísérleti csoport kifejlesztett egy új módszert fluoreszkáló SiC nanorészecskék előállítására, amelyeket különböző biológiai rendszerekben vizsgált. Azt találták, hogy a szilíciumkarbid nanorészecskék nem mérgezőek még magas koncentrációban sem, így valóban ígéretes *in vivo* biológiai jelzőrendszerek. Emellett először igazolták, hogy két-foton választ kaphatunk az idegsejtbe injektált SiC nanorészecskékből. Emellett a SiC-ban előforduló színcentrumokat elméleti számítások segítségével jellemezték, amelyek hasznosak lehetnek biológiai jelzőrendszerként. Például, közeli infravörös sugárzókat sikerült azonosítani kis SiC nanorészecskékben. Egy másik megoldást is kidolgoztak *in vivo* jelölésre, amelyet kénnel telített nanogyémánttal lehetne megvalósítani.

Kísérleti szilárdtest-fizikai kutatások

Nem-egyensúlyi ötvözetek kutatása. – Co₂FeAl_{1-x}Si_x Heusler ötvözetek mágneses tulajdonságait vizsgálták Mössbauer spektroszkópiái, SQUID és kaloriméteres (Curie hőmérséklet meghatározására) mérések segítségével. Az irodalmi adatok alapján ezeket az ötvözeteket az L2₁ kristályszerkezetben félfémes ferromágneses (a kisebbségi spin állapotsűrűség 0) anyagoknak tartják, amelyek rendkívül ígéretesek a spintronika számára. Eredményeik ellentmondanak az általános vélekedésnek: az atomi rend változik az Al-Si helyettesítésre (röntgenméréseik szerint a Co₂FeAl B2 szerkezetű, amely x=0,5 körül vált az L2₁ szerkezetbe) – és ez az atomi rendváltás megfigyelhető a mágneses tulajdonságokban és a hiperfinom paraméterekben. A Mössbauer mérések segítségével meghatározták a Fe atomok lokális mágneses momentumának koncentráció függését, ami segíti annak az elméleti zűrzavarnak a feloldását, amely ezen ötvözetrendszer feltételezett félfémes természetével kapcsolatos.

Különleges szén nanoszerkezetek kutatása. – Hidrogénhidakkal kapcsolódó komplex önszerveződő szupramolekuláris rendszerek dinamikáját vizsgálták hőmérsékletfüggő

infravörös spektroszkópia és molekuladinamikai számítások segítségével. A kutatás jelentőségét az adja, hogy ezek az anyagok a nukleinsavak egyszerű modelljeinek tekinthetők. Rezgési spektroszkópia segítségével Jahn-Teller torzulást mutattak ki a Cs_3C_{60} fulleridsók normál állapotában. Ez a különleges anyag kis nyomás hatására szupravezetést mutat, de légköri nyomáson szigetelő, ami az elektronok lokalizációjával (Mott-átmenet) magyarázható. Ilyen jelenségek számos új anyagcsaládban ismertek és magyarázatuk intenzív elméleti, illetve kísérleti kutatás tárgya. Eredményük jelentősen hozzájárult a lokalizáció mechanizmusának megértéséhez.

Fázisátalakulások elmélete. – Az atomisztikus fázismező modell keretében megvizsgálták a kristályos hordozón történő heterogén kristálymag-képződés szerkezeti aspektusait. Megmutatták, hogy a magképződés termodinamikai gátja, a hordozó-kristály-folyadék kontaktszög, és az adszorbeált kristályréteg vastagsága nem-monoton módon függ a rácsállandók arányától. Meghatározták továbbá az igen sikeres részecske-indukált megszilárdulás szabad növekedésen alapuló modelljének korlátait. Német kutatókkal közösen összefoglalót írtak az atomisztikus fázismező modellről és alkalmazásairól, ami a rangos *Advances in Physics* folyóiratban jelent meg.

Komplex folyadékok kutatása

A nyíró áramlásnak kitett makroszkópikus részecskék rendeződése kvantitatíven összevethetőnek bizonyult a molekuláris rendszerekben megfigyelhető nyírási orientációval. A részecskék az áramvonalakkal kis szöveget zárnak be, mely a nyírási ráta értékétől függetlenül adódik, de a részecskék hosszának növelésével csökken. A nyíró áramlás következtében kialakuló rendeződés hatására az anyag effektív sűrűdése lényegesen lecsökken a rendezetlen orientációjú rendszeréhez képest. Elkészült és megjelent a folyadékkristályok flexoelektromosságának elméletét, mérésének kísérleti módszereit, mintázatképződésben játszott szerepét, és alkalmazási területeit széleskörűen áttekintő könyv. Új, banán-alakú molekulákból álló folyadékkristályokat (pl. telített alkil láncokkal rendelkező vegyületeket, kuneán származékokat, királis vegyületeket) szintetizáltak és jellemezték. Új dielektromos mérési módszert dolgoztak ki a csavar-deformáció rugalmas állandójának meghatározására, és ezt hajlott-törzsű molekulákból álló nematikus anyagokra alkalmazták is.

Mágneses nanorészecskékkel adalékolt nematikusokban nagy mágneses terekre a fázisátmeneti hőmérséklet eltolódását, kis mágneses terekre pedig azok lineáris dielektromos választ igazolták. Nagy pozitív dielektromos anizotrópiával rendelkező nematikus folyadékkristályban (5CB) feltérképezték az egyen- és váltófeszültség kombinált hatására fellépő elektrokonvekciós (EC) folyamatokat. Más nematikusokban a váltófeszültség periódusán belül kialakuló mintázatokat a 10 mHz – 250 Hz frekvencia-tartományban vizsgálták. Az elméleti elvárásoknak megfelelően, ultra-alacsony frekvenciákon ismétlődő átmenetet detektáltak az EC és a flexoelektromos domének között. A két mintázat időben és a Fourier-térben is jól elkülönül.

Fémkutatások

Elektrolitikus nanoszerkezetek. – Elektrokémiai úton leválasztott Fe-Ni ötvözeteken kimutatták, hogy a leválasztás kezdetén kialakuló változó összetételű, mintegy 150 nm vastagságú zóna kiküszöbölhető, ha egyenáramú leválasztás helyett impulzusos leválasztást használnak. Értelmezték az elektrokémiai reakciók és az elektrolitban zajló anyagtranszport folyamatok szerepét az összetételi változások alakulásában. Az egyensúlyi elegyedésre nem képes Co-Pb fém párból elektrokémiai leválasztás útján szilárd granuláris elegyet hoztak létre.

Vizsgálták az így létrejött anyagi rendszer összetételének függését az előállítási paramétereiktől, meghatározták az anyag kristályszerkezetét és mágneses ellenállását, továbbá alacsony hőmérsékletű ellenállásmérésekkel feltárták a ferromágneses Co tartományok szerepét a Pb szupravezetési hőmérsékletének módosulásában. Elektrokémiai úton leválasztott Ni-Co/Cu multirétegek esetén kimutatták, hogy a két mágneses fém jelenléte a mágneses rétegben nagymértékben növeli a leváló anyag felületi durvaságát. Korrelációt mutattak ki a kapott anyag mágneses ellenállása és ennek szuperparamágneses hányada, valamint a kapott multirétegek felületi durvasága között. A felületi durvaság magas értékét az ötvözetképződés során az Ni és Co együttes leválását leíró mechanizmussal magyarázták meg.

Fémtechnológia és mágnesség. – Komplex, többkomponensű, ún. nagyentrópiájú ötvözetek (NEÖ) kutatásában értek el fontos eredményeket. Saját és irodalmi kísérleti adatok összegzése során megállapították, hogy (a) a szilárdság maximumhoz olyan összetétel tartozik, amelyre az egy atomra eső elektronszám (e/a) 6 körüli érték, (b) a keménység monoton nő az átlagos atomátmérő különbözőségével, (c) az egyfázisú kiterjedt szilárd oldatok fcc szerkezetűek, ha $e/a > 7,7$ és bcc szerkezetűek, ha $e/a < 7,5$. Közbülső e/a értékekre kétfázisú szerkezet jön létre. Az eredmények értelmezésére első elveken alapuló kvantummechanikai számolásokat végeztek a Wigner FK - KTH (Royal Institute of Technology, Stockholm) együttműködés keretében. Kiszámolták az elektronszerkezetet és a teljes kötési energiát ötkomponensű azonos koncentrációjú 3d ötvözetekre és megjósolták a rugalmassági modulusokat (B, G, E, ν). A számolások során, az irodalomban egyedülálló módon, figyelembe vették a lokális mágneses nyomatók hatását is. A számolásokat az egzakt muffin-tin orbitálok és az átlag tér koherens potenciálok módszerére alapozták egy átlag kristályszerkezet és véletlenszerűen eloszló komponensek feltételezésével.

Rádiófrekvenciás spektroszkópia – Számos fehérje szerkezeti jellemzőit vizsgálták proton-NMR segítségével. Meghatározták a szerkezeti rendezetlenség ismérveit az alacsony hőmérsékleti széles jelű tartományban megfigyelt NMR tulajdonságokban. Ezzel a módszerrel jellemezték a szerkezeti rendezetlenséget több fiziológiai és patológiai szempontból fontos fehérjében.

Neutronspektroszkópia kondenzált anyagokban

A fotoszintetikus szervezetek tilakoid membránjain folytatott kisszögű neutron és röntgenszórás kísérletek fontos mérföldköhöz érkeztek; jelentős újdonságértékű eredmények születtek az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont Növénybiológiai Intézetével közösen végzett kutatásokban. A külső környezet változásának hatását (fény, hő, ozmotikus nyomás, mágneses tér) és az ezekre bekövetkező nanoszerkezeti változásokat figyelték meg. A Budapesti Kutatóreaktornál valamint franciaországi és svájci neutronkutató központokban fiziológiás körülmények között, intakt leveken sikerült tanulmányozni a tilakoid membránrendszer struktúráját és fény-indukált változásait. Ezek a kísérletek és párhuzamos elektronmikroszkópiai vizsgálatok rávilágítottak arra, hogyan befolyásolja az izolálási módszer a levelekben megfigyelhető membrán szerkezetet. A fotoszintetizációs modell-fejlesztéssel összefüggésbe lehetett hozni a szerkezetváltozásokat a fiziológiailag fontos regulációs mechanizmusokkal.

Neutronszórás

Szinkrotron-forrásnál végzett röntgendiffrakció, anomális röntgenszórás, továbbá a kísérleteket követő Reverse Monte Carlo (RMC) analízis segítségével a $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ DVD-

alapanyag amorf és kristályos fázisában is azonosították a szerkezet alapjául szolgáló Ge-Te hálózatot. Részletes vizsgálatokat folytattak két elektrolitoldat, a céziumfluorid (CsF) és a céziumjodid (CsI) vizes oldatainak mikroszkópikus szerkezetét illetően. Röntgen-, illetve neutrodiffrakcióval az összes vizsgált koncentráción meghatározták a teljes szórásból származó szerkezeti függvényeket, amelyeket az RMC eljárás segítségével közös modellben egyesítettek molekuláris dinamikai szimulációk által szolgáltatott összes (10 db) parciális radiális eloszlásfüggvénnyel. Az anion-víz hidrogénkötésre jellemző X...H-O (X: F, I) részecske-elrendezések átlagos szögeinek nagyságát szabályosabbnak (azaz 180 fokhoz közelebbinek) találták, mint a víz-víz hidrogénkötést jellemző O...H-O részecske-hármasokét. A legtöményebb CsF oldatból a víz-víz hidrogénkötések gyakorlatilag eltűntek. Egy teljesen új Reverse Monte Carlo algoritmust, valamint a hozzá tartozó számítógépes programot, az RMC_POT eljárást, fejlesztettek ki. Az RMC_POT-ban a molekulákat kötő- és nemkötő kölcsönhatások (beleértve a diédes hozzájárulásokat) tartják egyben, valamint ezek felelősek az optimális molekula-alak kialakításáért is.

Lézerfény és szilárd anyag – főként nemlineáris – kölcsönhatásai

Kísérleti vizsgálatokat végeztek fém nanorészecskékről történő ultragyors fotoemisszióval kapcsolatban. Olyan nanorészecskéket tudtak előállítani, ahol a femtoszekundumos fotoemisszió és elektrongyorsítás lényegesen felerősödött a nanorészecskék „forró pontjainak” köszönhetően. Elsőként bizonyították be, hogy ezeknek a nanostruktúráknak a közelében ún. ponderomotoros elektrongyorsítás játszódik le, és egyértelmű korrelációt találtak a nanolokalizált tér felerősödése és a mért elektronspektrumok között. A Nemzeti Fejlesztési Ügynökség hELios pályázati forrása segítségével felépítettek egy multifunkcionális attoszekundumos laboratóriumot. Több munkaállomást is létrehoztak egy 4 mJ-os impulzusenergiájú, 35 fs-os impulzushosszú, 1 kHz-es Ti:zafir lézer segítségével, melyek magasrendű felharmonikusok keltésére, XUV spektroszkópiára, ultragyors fotoemisszió vizsgálatára és optikai roncsolási küszöb mérésére alkalmasak. Elméleti kutatásaik keretében kidolgozták az ultrarövid lézerimpulzusok grafén rétegen történő szóródásakor keletkező extrém elektromágneses sugárzási terek egzakt elméleti leírását. Eredményeik szerint ezek a terek optikai négyszögimpulzusokat tartalmaznak, amelyek elvben a bejövő impulzusok vivőburkoló fáziskülönbségének mérésére is használhatók. Új típusú, kétdimenziós koherens Röntgen-forrás elméleti alapjait dolgozták ki, amely ultrarelativisztikus elektronok hengerhullámvezetőben visszacsatolt szinkrotron supersugárzásán alapul. A kvantuminformatika és adatfeldolgozás területén meghatározták a hőszugárzás zajából eredő fizikai kerekítési hibák digitális statisztikáját.

Gázlézerek és gázkisülések

Kettős rádiófrekvenciával gerjesztett elektromos gázkisülések leírására alkalmas részecske alapú numerikus szimulációval meghatározták, hogy a felületekre érkező ionáram energiájának és fluxusának független kontrollja romlik alacsony frekvenciákat alkalmazva. Kifejlesztettek egy modern Franck-Hertz cellát, amelyben az elsődleges elektronokat fotoeffektus biztosítja. Ezen rendszer komplex elektron kinetikáját Monte Carlo típusú sztohasztikus részecske szimulációval térképezték fel. Elektromosan töltött részecskék sokaságában, molekuladinamikai szimulációk segítségével kimutatták, hogy a részecskék közötti erős csatolás elősegíti a kétnyaláb-instabilitás kialakulását. Kapcsolatot mutattak ki a Maxwell relaxációs idő és a komplex sokrészecske rendszerekben megfigyelt rugalmas és disszipatív viszkozitás komponensek aránya között, amelyek periodikus nyírás esetén figyelhetők meg. Két-, és háromdimenziós, kétkomponensű Yukawa rendszerek

hullámdiszperziós relációinak elemzése kimutatta, hogy erős csatolás esetén a fémötvezeteknél alkalmazott átlag-atom modell érvényes. Surfatron-nal keltett mikrohullámú Ar-O₂-N₂ felületi-hullám kisülés áramló utókisülésében kísérletileg és szimulációval meghatározták az aktív komponensek sűrűségeit.

Az elektrolitkatódú atmoszferikus ködfénykisülési (ELCAD) rendszert kalibrálták atomabszorpciós spektroszkópiai mérésekkel néhány szennyezés (Cd, Cu, Na és Zn) esetére.

Lézeralkalmazások, amorf vékonyrétegek

Az ELI_09-1-2010-0010 NFÜ (Helios) projekt keretén belül létrehoztak két új laboratóriumot, ahol kifejlesztettek egy attoszekundumos impulzusok generálására alkalmas berendezést. Az attoszekundumos impulzus sorozatot egy 35 fs-os, 4 mJ-os, 800 nm-es lézerrel generálják 1 kHz-es ismétlési frekvenciával nemesgáz-sugárban magas harmonikusok szuperpozíciójával. Ezen kívül kifejlesztettek egy ultragyors impulzusok által keltett plazmonok vizsgálatára alkalmas berendezést, egy roncsolási küszöbmérő és egy fényszórás-mérő berendezést. Az új 3D-s interferometrikus felület-elemző berendezéssel megvizsgáltak több optikai hordozót, vékonyréteget, ion-implantált felületet, fémüveget és polimert.

A korábban kifejlesztett légzés-szimulátorral és miniatűr Doppler sebességmérővel megvizsgálták az aeroszokok áramlását realiztikus üreges tüdőmodellekben. Összehasonlították a numerikus modellezéssel kapott eredményeket a kísérleti adatokkal. Letesztelték a múlt évben fejlesztett Nano-LDA foton korrelációs berendezésüket a Cambridge-i és a Clausthal-i egyetemeken, ahol ~100 nm-es részecskék tulajdonságait mérték. A mért adatok jó egyezést mutattak más módszerekkel kapott eredményekkel.

Nanokristályos gyémántban célzott színcentrumokat alakítottak ki, amelyek fontosak a kvantum-számítástechnikában és fluoreszcens biomarkerekben. A gyakorlati alkalmazás szempontjából alapvető fontosságú a színcentrum jellemzői és az előállítási paraméterek közötti összefüggések feltárása, valamint a kapott szerkezetek stabilitása. Különböző leválasztási paraméterek mellett előállított Si-V centrumokat tartalmazó nanogyémánt vékonyrétegek optikai és rezgési spektroszkópiai vizsgálatával sikerült meghatározni a hordozóhőmérséklet és a kiinduló gázkeverék metánkoncentrációjának hatását a Si-V centrumok emissziós jellemzőire. A hatékonyan emittáló Si-V centrumokat tartalmazó nanogyémánt szerkezetek előállításához kompromisszumokat kell kötni az egyes paraméterek tekintetében. A fotostabilitási teszteken mindegyik szerkezet kiválóan teljesített: a Si-V centrum emissziós sávjának jellemzői különböző, 12 és 144 kW/cm² közötti teljesítménysűrűségekkal 488 nm-es hullámhosszon végzett, 10 órán át tartó fénykezelés során sem módosultak. A vizsgált mintáknál az emissziós intenzitás a gerjesztő fény teljesítményének függvényében 79 kW/cm² teljesítménysűrűségnél vihető telítésbe, így a centrumsűrűség meghatározható. Jellemzőik alapján ezen nanogyémánt szerkezetek kiváló gyakorlati alkalmazási potenciállal rendelkeznek.

Femtoszekundumos lézertechnika

A nemlineáris mikroszkópiás kutatócsoport jelentős eredményeket ért el különböző betegségek diagnosztikai módszereinek fejlesztésében, például különböző bőrbetegségek felismerésében, fizikai behatárolásában, vagy gyógyszerkészítmények bőrön keresztül történő bejuttatásának monitorozásában, együttműködve a Semmelweis Egyetem Bőrklínikájának kutatóival, illetve gyógyszeripari partnerekkel, például a Genetic Immunity-vel. Ezekhez a mérésekhez továbbfejlesztették hagyományos pásztázó kétfoton abszorpciós fluoreszcencia

mikroszkópjukat egy másodharmónikus (SHG) detektáló egységgel, aminek segítségével 3D-ben mérni tudták a bőr kollagén hálózatát. Az auto-fluoreszcencia és SHG detektálása mellett az ún. CARS módszer lehetővé teszi a szövetek detektálását fluoreszcens jelölések alkalmazása nélkül. E módszer alkalmazásához a múlt évben kifejlesztettek egy optikai szállézeres technológián alapuló egységet, aminek segítségével CARS méréseket is tudtak végezni mikroszkópjukkal. Ebben az évben ipari partnerükkel, az R&D Ultrafast Lasers Kft-vel kifejlesztettek egy zárt dobozolású, automatikus vezérlésű változatot, és ezt különböző orvos diagnosztikai, biológiai vizsgálatoknál használták eredményesen, pl. zsírszövet vagy agyszövetek vizsgálatánál.

Optikai vékonyrétegek

Kifejlesztették az ultrarövid impulzusú lézerekészülékekben alkalmazható új optikai bevonatos elemek technológiáját. Például: (a) nagy reflexióképességű és kis diszperziójú dielektrikum lézertükrök leválasztása nagy átmérőjű üveghordozókon, (b) nagy optikai roncsolási küszöbű nyalábosztó bevonatok elektronsugaras leválasztása nagy átmérőjű Suprasil 1 anyagú kvarcüveg hordozókon, (c) a 770 – 850 nm hullámhossztartományban, 45° beesési szögnél a fény polarizációs állapotától független, nagy visszaverő képességgel és fázistolással rendelkező dielektrikum lézertükrök készítése, amivel a fázisban kódolt információ megváltoztatása nélkül manipulálhatók fényjelek. A felsorolt és további kutatási feladatok megoldásában és hasznosításában minden esetben az Optilab Kft. – egy tipikus mikro-vállalkozás – az üzleti partner, a korábbi gyakorlatnak megfelelően.

Optikai egykristályok növesztése és vizsgálata

Magvezérelt flux módszerrel növesztett, erősen Eu+Tb - adalékolt $GdAl_3(BO_3)_4$ (GAB) egykristályokban új politipikus módosulatot fedeztek fel. Az új, monoklin fázis (C2/c, Z=8) szerkezetét és az azt felépítő egységek geometriai paramétereit röntgendiffrakciós módszerekkel határozták meg. Orvosi alkalmazási célokra tiszta és ritkaföldfémekkel adalékolt LYB, $Li_6Y(BO_3)_3$ (Er, Yb) és LGB, $Li_6Gd(BO_3)_3$ (Ce) szcintillátor kristályokat növesztettek Czochralski módszerrel, különböző módon termikusan kezelt alapanyagokból. A kristályok minőségét spektroszkópiai módszerekkel igazolták. Nanokristályos szerkezetű ittrium oxi-ortoszilikát (YSO) és lutécium– ittrium oxi-ortoszilikát (LYSO) fázisokat állítottak elő különböző nedves kémiai eljárásokkal. A köztes és végső reakció termékeket röntgendiffrakciós, FTIR és Raman spektroszkópiai módszerekkel azonosították. Ferroelektromos $K_3Li_2Nb_5O_{15}$ (KLN-1) kristályokat növesztettek magvezérelt flux módszerrel tiszta, valamint Na^+ , Rb^+ és Cs^+ - adalékolt oldatokból. Igazolták, hogy a Cs_2O adalék az idegen helyen ülő Nb-ionok és az alkáli vakanciák mennyiségét egyaránt csökkenti, így ideális flux anyagnak tekinthető. A forgatási sebesség folyamatosan változtatásával biztosították a sztöchiometrikus $LiNbO_3$ kristályok Czochralski növesztésénél a közel sík növekedési felületet, így kerülve el a facettás növekedés okozta kristályhibákat. Elektrolit-katódos, atmoszférikus fénykísülés (ELCAD) celláját illesztették az atomabszorpciós spektrométerhez. Kalibrációs görbék segítségével meghatározták a cellában néhány környezetileg káros szennyezés (Cd, Cu, Na és Zn) mennyiségét.

Kristályfizika és nemlineáris optika

Kongruens összetételű lítiumniobátban a hologramok termikus fixálásában szerepet játszó OH^- ionok beépülését modellezték DFT módszerrel, 810 atomból álló supercellát alapul véve a SIESTA programban. A számított szabad- és Fermi energia értékek jó egyezésben

vannak az IR és UV tartományban a hőmérséklet függvényében mért abszorpciós eredményekkel. Nagytisztaságú, termikusan redukált LiNbO_3 egykristályokban tranziens hologramokat hoztak létre a látható tartományban, melyek valós idejű holográfiában is alkalmazhatók. A nemkollineáris elrendezésben ns-os impulzuspárokkel keltett ms-os élettartamú fázisrácsok a létrehozott elektron- és lyukpolaronok sűrűségének térbeli modulációjával kapcsolatosak. Lítium-ittrium-borát ($\text{Li}_6\text{Y}(\text{BO}_3)_3$) egykristályokban az Er adalék beépülését és elektronnívóinak felhasadásait EPR-rel valamint nagyfelbontású abszorpciós és emissziós spektroszkópiával jellemezték. Koherens sugárzási folyamatok megfigyelésére alkalmas rendszerek kiválasztása céljából meghatározták Yb-mal vagy Er-mal adalékolt LiNbO_3 és $\text{Li}_6\text{Y}(\text{BO}_3)_3$ kristályok 980 nm körüli optikai átmeneteinek homogén vonalszélességét, valamint a dipól- és populációs relaxációs időket. Kálium-lítium-niobát (KLN) kristályok fázisátmenetét vizsgálták a dielektromos állandó (ϵ) hőmérsékletfüggésének mérésével és megállapították, hogy az ferroelektromos relaxor típusú a szokásos niobiumtöbblettel rendelkező összetételek esetén. Megmutatták, hogy a $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7\text{:Cu}$ szövetekvivalens termolumineszcens doziméter és neutron-detektor anyag lumineszcencia hozamát további adalékok, mint az Ag és Mn jelentősen megnövelik. Bizmut germanátokban és Pyrex valamint Er-mal adalékolt volfram tellurit oxid-üvegekben optikai diffrakciós rácsokat és sík- vagy csatorna-hullámvezetőket hoztak létre N^+ ionok egy- és kétenergiás implantálásával, illetve C^{3+} és/vagy C^{5+} ionok, illetve fókuszált mikro-nyalábjaik besugárzásával.

Kvantumoptika és kvantuminformatika

A „no-go theorem” néven elhíresült állítással szemben megmutatták, hogy a Dicke-modell jól írja le a fény kölcsönhatását atomok belső szabadsági fokával, ám nem az elektrodinamika $A \cdot p$ mértékében (minimáliscsatolás-mérték), hanem a $D \cdot r$ mértékben (elektromosdipól-mérték). A transzverz elektromos átlagtér spontán kialakulása által jelzett fázisátalakulás elvben nem zárható ki. Variációs véges bázis/variációs diszkrét változós reprezentációs Hamilton operátort vezettek le, mely többek között (kvantum) molekula-dinamikai számításokban válhat hasznossá. Elektronikusan kontaktált, harmonikusan rezgő szén nanocsőben folyó mezoszkópikus áram korrelációs függvényének mérésére dolgoztak ki eljárást, amely egy mágneses térben csapdázott spinor Bose-Einstein kondenzátumhoz való csatoláson alapszik. Megmutatták, hogy a szén nanocső és semleges atomok kondenzátuma között elegendően erős csatolás alakítható ki az összetevők közötti kvantuminformáció közvetítéséhez, ezért a hibrid interfész sokféle további alkalmazás fizikai alapját képezheti. Permutációsan invariáns kvantum tomográfia témakörében hatékony módszert dolgoztak ki fizikailag megengedett állapot mért adatokra illesztésére. Megmutatták, hogy a maximális metrológiai pontossághoz valódi többtest összefonódásra van szükség. Megmutatták, hogyan alkalmazhatóak a spin-összenyomási összefonódottság kritériumok abban az esetben, ha a részecskeszám-variancia nem nulla. Részt vettek egy kétdimenziós kvantumos bolyongást elsőként megvalósító kísérletben, amelyben a kvantumos bolyongót fényimpulzusok testesítették meg. Diszkrét idejű kvantumos bolyongás viselkedését vizsgálták dinamikus perkolációs gráfokon. A véletlenszerűen változó gráf egy speciális nyílt kvantumrendszerhez vezet, ez a probléma numerikusan nehezen kezelhető. Sikerült analitikus eszközökkel meghatározni az aszimptotikus viselkedést és kimutatni, hogy nem csak teljes keveredés jöhet létre, de megjelenhetnek aszimptotikusan oszcilláló állapotok is. Vizsgálták 1-es spinű, alacsony hőmérsékletű Bose-gáz hosszúhullámú elemi gerjesztéseit mágneses tér jelenlétében. Kidolgoztak erre a célra egy háromfolyadék hidrodinamikai leírást, amelyben csatolt hullámegyenletet származtattak a termodinamikai fluktuációk leírására. A gáz állapotegyenlete segítségével vizsgálták a gerjesztések keveredését (nyomás, hőmérséklet és mágneses polarizációs hullámok) és azonosították a kritikus módust.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet egyes kutatási eredményei átlépték a gyakorlati alkalmazás küszöbét. Különösen igaz ez a neutronfizikai kutatásokra, melyek egyben szép példát adnak a kutatás – alkalmazás – népszerűsítés komplex folyamatára.

A magyarországi neutronkutatás fő bázisa az MTA csillebérci kutatóreaktora, mely az elmúlt 20 évben – mint az egyetlen európai léptékű hazai kutatási infrastruktúra – a társadalmi hasznosulás fontos intézménnyé vált, mind a tudományos mind a nemzetgazdasági tevékenységek tekintetében. Ebből az alkalomból több összefoglaló cikk jelent meg pl. a Magyar Tudományban valamint a Nukleon c. folyóirat két számában is. Külön kiemelésre érdemes, hogy 2012 novemberében - a Magyar Tudomány Ünnepe program keretében - a Budapesti Neutronközpont (BNC) önálló rendezvénnyel mutatkozott be az ELTE TTK-n a neutronkutatások népszerűsítésére az egyetemi közegben. A Taylor & Francis kiadó által megjelentetett, Neutron News c. szakfolyóirat 23. évfolyam 1. számában a neutron holográfia téma látványos ábrái címoldali megjelenésével és a „Featuring: The Budapest Neutron Centre” kiemeléssel tipikus intézeti eredményeket bemutató cikksorozat jelent meg. Ugyanennek a Neutron News-nak a hátoldalán a BNC-t bemutató reklám hívja fel a figyelmet a felhasználói lehetőségekre.

A gazdasági szférával együttműködésben számottevő eredményt sikerült elérni a neutronfizikai metodikai fejlesztési eredmények technológia transzferében. Több fejlesztés jutott el abba a fázisba, hogy az együttműködő kisvállalkozások révén a vonatkozó műszergyártás export bevétele százmillió forintos nagyságrendet ért el. Konkrétan, 2012-ben egy kulcsrakész komplett neutron berendezés (ún. három-tengelyű kristályspektrométer) szállítására került sor az egyik Kínában épülő kutatóreaktor központ számára (közel 1 M€ értékben). Ez a műszer számos hazai fejlesztési eredmény (neutronoptikai modulok, sugárvédelmi komponensek, adatgyűjtő elektronika, mérésvezérlő szoftver) hasznosításával készült el – teljes egészében hazai tervezés és kivitelezés mellett. Az intézet jelentős árbevételhez jutott a K+F szerződések és a kínai szakemberek tréningje révén.

Figyelemre méltó eredményeket sikerült elérni a fémkutatások eredményeinek gyakorlati hasznosítása területén is. A Finemet típusú lágymágneses nanokristályos ötvözetek alkalmazására nagymennyiségű (1 kg/ciklus) szalag gyártására alkalmas módszert dolgoztak ki együttműködve a frissen végzett diákok által alapított H-ion nevű (spin-off) kft-vel. Három ipari pályázatban hasznosítják a mágneseres és mechanikai húzófeszültség alatt végzett hőkezelésekkel testre szabott hiszterézis görbéjű vasmagokat.

Több kutatócsoportban folynak olyan munkák, melyek gyakorlati alkalmazása csak hosszabb távon várható. Íme, néhány példa: Alaputatási kísérleteket végeztek fém nanorészecskékről extrém rövid idő (femtosekundumok) alatt kilépő elektronokkal kapcsolatban, és eddig ismeretlen elektrongyorsítási folyamatokat mutattak ki. A fém nanorészecskék nagy jelentőséggel bírnak számos területen a napelemek fejlesztésétől kezdve egészen egyes rákterápiás lehetőségekig, ezért az ezekben lejátszódó alapjelenségek kutatása is fontos. Elméleti kutatásaik keretében a grafénon szóródó ultrarövid fényimpulzusok hullámhosszon belüli pontos alakjának elméleti vizsgálata során négyszög alakú impulzusokat fedeztek fel. Röntgen-lézerek egy speciális fajtájának, az ún. hullámvezető szupersugárzók elméletét dolgozták ki. A kvantuminformatica és adatfeldolgozás területén, meghatározták a hősugárzás zajából eredő kerekítési hibák véletlen eloszlásait.

A nemlineáris mikroszkópián alapuló diagnosztikai módszereket fejlesztettek ki, ezek jelentősek lehetnek különböző betegségek korai diagnosztizálásában, vagy gyógyszerkészítmények kifejlesztésénél, melyek kiemelkedően fontosak a társadalom számára. Új sugárzásdetektorok, mint a LYB, GYN, YSO és LYSO szcintillátor kristályok kifejlesztése, hatásfokuk javítása az orvosi diagnosztikai és a sugárzás-biztonságtechnikai alkalmazások számára alapvető. A nemlineáris optikai kristályok, mint a YAB orvosi és műszaki alkalmazásokban fontos lézerek (UV-látható) létrehozását teszik lehetővé. Az ELCAD analitikai eljárás alkalmazása környezeti kockázatot jelentő szennyező anyagok folyamatos, helyszíni vizsgálatát teszi lehetővé.

Az oxidkristály-kutatás egyik legfontosabb gyakorlati célja az egyre tökéletesebb nemlineáris és integrált optikai alkalmazások kifejlesztése, melyek forradalmasíthatják például a valós idejű holografikus adatfeldolgozást. A niobátokat és borátokat jelenleg is széleskörűen alkalmazzák kommunikációs és érzékelő/aktuátor rendszerekben, többek között orvosi célokra is. Egy másik cél a koherens optikai alkalmazások korszakának előkészítése, mely elvezethet a kvantumszámítógépekhez.

Az intézet munkatársai számos lehetőséget használtak ki a kutatási eredmények bemutatására, a tudomány népszerűsítésére. A Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából szervezett Wigner Nyílt Napokon a kutatóközpont 10 laboratóriumában 9 gimnázium 150 diákját fogadták. Részt vettek az ELTE TTK Bolyai Kollégium megalapításának 20 éves jubileumi rendezvénysorozatán „Kvantummechanika 100 év után, a nanotechnológia korszakában” előadással (ELTE, 2012. szeptember 8. Budapest). Előadást tartottak a MTA Miskolci Területi Bizottsága szervezésében a nagyközönség számára rendezett népszerűsítő sorozat keretében „Az atomi szerkezet szerepe a tudományban és hétköznapjainkban” címmel. Ismeretterjesztő cikket közöltek a határfelületeken történő kristályos önszerveződésről a Fizikai Szemle hasábjain. Kétnapos laborbemutatót szerveztek középiskolás fiatalok számára a Wigner FK SZFI Szerkezetkutató valamint NMR Laboratóriumában. A tudományt népszerűsítő előadást tartottak a Szent László Gimnázium Természettudományos Önképzőkörében „A kvantumfizika varázslata” címmel 2012. nov. 26-án.

Szakértőként járultak hozzá számos napilapban és sajtótermékben megjelent cikk elkészítéséhez, amelyekben a 2012. évi fizikai Nobel díj indoklását értelmezték a széles közönség számára. Az intézet egyik munkatársa a Kossuth Rádió Szonda című műsorában (2012. március 11.), valamint az Index (március 9.) és a Népszabadság (március 21.) napilapokban a kvantum bolyongás megvalósításának témájában adott interjút.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet kutatásai során széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésekre támaszkodik. Történelmi előzmények, tematikai hasonlóságok és a közös infrastruktúra használata folytán korábban is léteztek formális és informális kapcsolatok a KFKI campus akadémiai intézetei között. Azáltal, hogy 2012-ben a campuson két kutatóközpont alakult, a kapcsolatok egy része még szorosabbá vált. Különösen igaz ez a Budapesti Lézer-technológiai Kutatólabor esetére, melyben a közös feladatokon dolgozó, de különböző intézetekhez tartozó kutatócsoportok egy kutatóközponton belül eredményesebben folytathatják munkájukat. Továbbra is fontos együttműködő partner az MTA Energiatudományi Kutatóközpont Atomenergia-kutató

Intézete (AEKI), mellyel a Budapesti Neutronközpont keretében folynak közös kutatások a kísérleti atomreaktor hasznosítása érdekében.

Felsőoktatás

Az intézet munkatársai több egyetemen vesznek részt a graduális és posztgraduális képzésben a szilárdtest-fizika, az anyagtudomány és az optika tárgykörében. Különösen eredményes együttműködés alakult ki az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi karán (ELTE TTK) és a BME TTK Fizikai Intézetében folyó fizikus képzés területén. A vidéki egyetemek közül a Szegedi és a Pécsi Egyetem fizikai intézeteivel való kapcsolat érdemel kiemelés. 2012-ben az intézet 30 kutatója vett részt az egyetemi oktatásban rendes és speciális előadások tartása, illetve laboratóriumi gyakorlatok vezetése formájában. Az intézet munkatársai 32 elméleti és 12 kísérleti kurzust tartottak doktorandusok részére. 21 kutató tagja az egyes egyetemek Doktori Iskolájának.

Az intézetben 13 hallgató dolgozott diplomamunkája, 33 pedig PhD dolgozata összeállításán. Ezen hallgatók nagy része olyan kísérleti berendezéseken végezhetette kísérleti munkáját, melyek másutt nem állnak rendelkezésre az országban. Az intézet munkatársai közül egy lett az MTA doktora, hat nyert el PhD fokozatot.

Nemzetközi kapcsolatok

A nemzetközi kapcsolatok alapját főleg az EU 7. keretprogramjához tartozó és egyéb nemzetközi projektek (ESA, IAEA, COST), kétoldalú akadémiai és TÉT egyezmények, továbbá intézetek közötti kétoldalú megállapodások képezik. Különösen intenzív sokoldalú együttműködés jellemzi a Budapesti Neutron Központ keretében végzett kutatásokat. 2012-ben megszervezték a 6. Közép-európai Iskolát a neutronszerzés területén. Az ötnapos továbbképzés folyamán a résztvevő fiatalok nemcsak előadásokat hallgattak, hanem lehetőségük nyílt kísérleti munkát is végezni a központ nagyberendezésein. Nagy érdeklődés és intenzív diszkusszió követte az egyik amerikai professzor előadását, aki az akadémiai kutatásokban rejlő üzleti lehetőségeket elemezte.

Kétoldalú akadémiai megállapodások alapján 11 ország kutatóival 24 témában folytak kutatások, közülük 4 DAAD téma kezdődött 2012-ben. A kormányközi tudományos és technológiai megállapodások (TÉT) keretében 8 ország kutatóival 9 témában folytak közös kutatások, közülük 5 kezdődött 2012-ben. A fenti együttműködések egészíti ki több bilaterális egyezmény, ausztriai, francia, német, spanyol és USA-beli intézetekkel.

A nemzetközi kapcsolatok építése szempontjából nagyon fontosak kutatóik külföldi munkavállalásai és az ösztöndíjak. Az év folyamán 22 kutató dolgozott külföldön félévnel rövidebb és 12 kutató félévnel hosszabb ideig. Egyik kutatójuk - nemzetközi kutatócsoport tagjaként - társszerző egy Science cikkben. Svédországban dolgozó két munkatársuk publikációs tevékenysége is kiemelkedő az év folyamán publikált 16 cikkel. Az intézetben egy hónapnál hosszabb ideig dolgozó külföldi vendégkutatók száma a korábbi évekhez hasonlóan alakult: 10 vendég töltött 38 hónapot az intézetben, akik hat országból (India, Mexikó, Románia, Spanyolország, Ukrajna és az USA) érkeztek.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2012-ben az intézet a már meglévő két LENDÜLET projekt mellett, egy újabb projekttel gazdagodott. A „Tensor factorization in high-dimensional spaces and applications to ultracold

atomic systems and transition metal complexes” projekt célkitűzése a kvantumfizikai rendszerek jobb megértése, a kvantummechanika alaptörvényeire épülő új matematikai algoritmusok kifejlesztése. Ezek az algoritmusok több tudományterületen alkalmazhatók, például a szilárdtest-fizikában, a statisztikus fizikában, a kvantumoptikában és kvantuminformatikában. A svájci munkavállalásáról hazatért témavezető fiatal kutatókból álló kutatócsoport szervezését kezdte meg. Kutatásait egy újonnan elnyert OTKA pályázat is segíti (K100908 Simulating strongly correlated systems with fermionic alkaline earth atom isotopes in optical lattices). 2012-ben megállt az elnyert OTKA projektek számának és a támogatás mértékének évek óta tartó csökkenése. Míg 2009-ben hat új OTKA projekt 122 MFt, 2011-ben négy új projekt 72 MFt támogatásban részesült, a 2012-ben induló tíz projektre 202 MFt támogatás jut. Az új projektek zöme kísérleti jellegű és valamilyen korszerű anyagfőleség (K 101819 Design, fabrication and analysis of luminescent silicon carbide nanocrystals, PD 106130 Generation of highly luminescent color centers in nanocrystalline diamond, PD 104652 Realization of strongly correlated matter by ultracold atoms) vagy eljárás (K 04696 Electrodeposition of special magnetic materials from nonaqueous solutions, K 101225 Fabricaton of integrated optical elements via ion beam implantation) fejlesztését célozza.

A technológiai transzfer szempontjából fontos pályázatot nyert az intézet a MIRRORTRON Kft. által vezetett konzorcium tagjaként (NFÜ-MAG ZRt. KMR_12-1-2012-0226, Development of components for new generation neutron research instrumentation, 2012-2015). A Kutatási, Technológiai és Innovációs Alapból az intézet két kutatócsoportja közösen 175 millió Ft támogatást nyert fémüveg és multiréteg technológiák fejlesztésére azzal a céllal, hogy piaciilag versenyképes neutronoptikai, ill. neutron detektálási eszközök gyártását és nagy kutatási infrastruktúrák számára történő értékesítését elősegítse.

Az elnyert nemzetközi pályázatok közül két EU-s, a 7. keretprogramba tartozó projekt érdemel kiemeltet a projekt mérete és a résztvevő kutatócsoportok nagy száma miatt. Az EXOMET (FP7-NMP-2011-LARGE-5 280421) projektben 11 ország 27 szervezete (egyetem, kutatóintézet, vállalati fejlesztő laboratórium) működik együtt különleges mikro-szerkezetű és tulajdonságú könnyűfém ötvözetek fejlesztésén. A mechanikai tulajdonságok javítása révén az anyagfelhasználás és a környezetterhelés csökkenthető a földi és légiközlekedésben. Az intézet egyik kutatócsoportja a fémolvadékok megszilárdulásának modellezésével vesz részt a programban.

Az NMI3-II infrastruktúrális FP7-INFRASTRUCTURES-2011-1-283833 projekt az anyagtulajdonságok és a szerkezet összefüggéseinek jobb megértésére irányul egészen az atomi méretekig. Az ilyen kutatások alapvető módszere a neutron és a muon spektroszkópia. A projektben Európa legismertebb nukleáris kutatóintézetei vesznek részt, 18 partner 11 különböző országból. A projekt keretében erősítik az integrációt az eljárások összehangolása, standardok kidolgozása és az ismeretek megosztása révén. Különös figyelmet fordítanak a fiatal kutatók képzésére. Úgyszintén a nukleáris kísérleti módszerek fejlesztését célozza a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség által finanszírozott IAEA No. CRP1575 projekt is (Development, characterization and testing of materials of relevance to nuclear energy sector using neutron beams), melyben az intézet közreműködőként vesz részt.

2012-ben az intézet csatlakozott két COST együttműködéshez (COST Action MP1101, Biomedical applications of atmospheric pressure plasma technology, és COST Action MP1203, Advanced spatial and temporal X-ray metrology). Továbbá a Femtoszekundumos Lézerlabor a Laserlab Europe hálózat társult tagja lett.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Delczeg-Czirjak K, Bergqvist L, Eriksson O, Gercsi Z, Nordblad P, Szunyogh L, Johansson B, Vitos L: Microscopic theory of magnetism in the magnetocaloric material $\text{Fe}_2\text{P}_{1-x}\text{T}_x$ ($\text{T} = \text{B}$ and Si). *Phys. Rev. B*, 86: 045126 (2012)
2. Vajna Sz, Simon E, Szilva A, Palotas K, Ujfalussy B, Szunyogh L: Higher-order contributions to the Rashba-Bychkov effect with application to the Bi/Ag(111) surface alloy. *Phys. Rev. B*, 85: 075404-075411 (2012)
3. Delczeg L, Johansson B, Vitos L: Ab initio description of mono-vacancies in austenitic stainless steels. *Phys. Rev. B*, 85: 174101 (2012)
4. Balogh J, Bujdosó L, Kaptás D, Dézsi I, Nakanishi A: Top and bottom interfaces in Fe-B multilayers investigated by Mössbauer spectroscopy. *Phys Rev. B*, 85: 195429/1-6 (2012)
5. Tóth GI, Tegze G, Pusztai T, Gránásy L: Heterogeneous crystal nucleation: The effect of lattice mismatch. *Phys. Rev. Lett.*, 108: 025502/1-4 (2012)
6. Klupp G, Matus P, Kamarás K, Ganin AY, McLennan A, Rosseinsky MJ, Takabayashi Y, McDonald MT, Prassides K: Dynamic Jahn-Teller effect in the parent insulating state of the molecular superconductor Cs_3C_{60} . *Nat. Commun.*, 3: 912/1-6 (2012)
7. Emmerich H, Löwen H, Wittkowski R, Gruhn T, Tóth GI, Tegze G, Gránásy L: Phase-field-crystal models for condensed matter dynamics on atomic length and diffusive time scales: an overview. *Adv. Phys.*, 61: 665-743 (2012)
8. Éber N, Palomares LO, Salamon P, Krekhov A, Buka Á: Temporal evolution and alternation of mechanisms of electric field induced patterns at ultra-low-frequency driving. *Phys. Rev. E*, 86: 021702/1-9 (2012)
9. Börzsönyi T, Szabó B, Törös G, Wegner S, Török J, Somfai E, Bien T, Stannarius R: Orientational order and alignment of elongated particles induced by shear. *Phys. Rev. Lett.*, 108: 228302/1-5 (2012)
10. Buka Á, Éber N (Eds.): Flexoelectricity in Liquid Crystals. Theory, Experiments and Applications. Imperial College Press, London, ISBN: 978-1-84816-799-5 (2012)
11. Bakonyi I: Relevance of Fe atomic volumes for the magnetic properties of Fe-rich metallic glasses. *J. Magn. Magn. Mater.*, 324: 3961-3965 (2012)
12. Jafari Fesharaki M, Péter L, Schucknecht T, Rafaja D, Dégi J, Pogány L, Neuróhr K, Széles É, Nabiyouni G, Bakonyi I: Magnetoresistance and structural study of electrodeposited Ni-Cu/Cu multilayers. *J. Electrochem. Soc.*, 159: D162-D171 (2012)
13. Neuróhr K, Dégi J, Pogány L, Bakonyi I, Ungvári D, Vad K, Hakl J, Révész Á, Péter L: Composition, morphology and electrical transport properties of Co-Pb electrodeposits. *J. Alloy. Comp.*, 545: 111-121 (2012)
14. Ohara K, Temleitner L, Sugimoto K, Kohara S, Matsunaga T, Pusztai L, Itou M, Ohsumi H, Kojima R, Yamada N, Usuki T, Fujiwara A, Takata M: The roles of the Ge-Te core network and the Sb-Te pseudo network during rapid nucleation-dominated crystallization of amorphous $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$. *Advanced Functional Materials*, 22: 2251-2257 (2012)
15. Mile V, Gereben O, Kohara S, Pusztai L; On the structure of aqueous cesium fluoride and cesium iodide solutions: Diffraction experiments, Molecular Dynamics simulations and Reverse Monte Carlo modeling. *J. Phys. Chem. B*, 116: 9758-9767 (2012)
16. Gereben O, Pusztai L; RMC_POT, a computer code for Reverse Monte Carlo modeling the structure of disordered systems containing molecules of arbitrary complexity. *Journal of Computational Chemistry*, 33: 2285–2291 (2012)
17. Rácz P, Dombi P: Non-ponderomotive electron acceleration in ultrashort surface plasmon fields. *Phys. Rev. A*, 84: 063844/1-5 (2011)

18. Magyar P, Korolov I, Donkó Z: Photoelectric Franck-Hertz experiment and its kinetic analysis by Monte Carlo simulation. *Phys. Rev. E*, 85: 056409/1-10 (2012)
19. Kalman GJ, Donkó Z, Hartmann P, Golden KI, Kyrkos S: Collective modes in strongly coupled binary liquids. *Contrib. Plasma Phys.*, 52: 234-237 (2012)
20. Goree J, Donkó Z, Hartmann P: Cutoff wave number for shear waves and Maxwell relaxation time in Yukawa liquids. *Phys. Rev. E*, 85: 066401/1-7 (2012)
21. Gyollai I, Gucsik A, Veres M, Koós M, Nagy Sz, Bérczi Sz: A combined petrographic and micro-Raman study of meteoritic microdiamond in ALH-77257 Ureilite and ALH-78113 Aubrite. *Spectroscopy Letters*, 45: 151-155 (2012)
22. Veres M, Tóth A, Mohai M, Bertóti I, Szépvölgyi J, Tóth S, Himics L, Koós M: Two-wavelength Raman study of poly(ethylene terephthalate) surfaces modified by helium plasma-based ion implantation. *Applied Surface Science*, 263: 423-429 (2012)
23. Antal P, Szipócs R: Tunable, low-repetition-rate, cost-efficient femtosecond Ti:sapphire laser for nonlinear microscopy. *Appl. Phys. B*, 107: 17-22 (2012)
24. Erdei G, Berze N, Péter A, Játékos B, Lőrincz E; Refractive index measurement of cerium-doped $\text{Lu}_x\text{Y}_{2-x}\text{SiO}_5$ single crystal. *Opt. Mater.*, 34: 781-785 (2012)
25. Bruening H, Dieckmann V, Schoke B, Voit KM, Imlau M, Corradi G, Merschjann C: Small-polaron based holograms in LiNbO_3 in the visible spectrum. *Opt. Express*, 20: 13326-13336 (2012)
26. Kálmán O, Kiss T, Fortágh J, Domokos P: Quantum galvanometer by interfacing a vibrating nanowire and cold atoms. *Nano Letters*, 12: 435-439 (2012)
27. Kollár B, Kiss T, Novotny J, Jex I: Asymptotic dynamics of coined quantum walks on percolation graphs. *Phys. Rev. Lett.*, 108: 230505/1-5 (2012)
28. Schreiber A, Gábris A, Rohde PP, Laiho K, Štefaňák M, Potoček V, Hamilton C, Jex I, Silberhorn Ch: A 2D quantum walk simulation of two-particle dynamics. *Science*, 336: 55-58 (2012)

**AZ MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI
ADATAI 2012-BEN**

Főbb mutatók 2012-ben

MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont*

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	375	Ebből kutató ² :	220	
PhD, kandidátus:	122	MTA doktora:47	Rendes tag és levelező tag:	6
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				5
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				80

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				1250
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				1237
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				6
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				5
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				1034
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				812
Könyv, atlasz	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul:	4	idegen nyelven:	10

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	2969,155	Összes független hivatkozás száma:	12273
Összes hivatkozás száma ⁸ :	15900		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	9	MTA doktora:	2
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			234
		poszterek száma:	101
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	66	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	24
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	14		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			73
Témavezetések száma: TDK munka:	7	Diplomamunka (BSc):	17
Diplomamunka (MSc):	29	PhD:	55

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		2155 910	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	28	Teljes saját bevétel:	9415 845 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			51
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	274 886 E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			8
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	8438 351 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			34
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	237 915 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			15
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	144 127 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		586 094	E Ft

* A kutatóközponti adatok hitelesek, ellenőrzöttek; a kutatóközponton belüli intézeti adatok tájékoztató jellegűek

Részletezett pénzügyi adatok 2012-ben

MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	2155 910	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	9415 845	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	274 886	E Ft
Innovációs Alapból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	8438 351	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	237 915	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	144 127	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	13 209	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	570 885	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	2000	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA Wigner FK Részecske- és Magfizikai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	206	Ebből kutató ² :	103	
PhD, kandidátus:	56	MTA doktora:21	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				31

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :				1021
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :				1016
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:				3
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:				4
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:				840
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció				634
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:		0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 4	idegen nyelven:		3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	2354,56	Összes független hivatkozás száma (2011):	8533
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			10964

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 3	MTA doktora:	1
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			114
		poszterek száma:	30
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	36	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	10		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			43
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	12
Diplomamunka (MSc):	21	PhD:	22

Főbb mutatók 2012-ben

MTA Wigner FK Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	170	Ebből kutató ² :	127	
PhD, kandidátus:	59	MTA doktora:25	Rendes tag és levelező tag:	5
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :				3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :				58

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	233		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	225		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	3		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	1		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	198		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	182		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	7

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	625,78	Összes független hivatkozás száma (2011):	3761
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			4966

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 6	MTA doktora:	1
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	120		
poszterek száma:	71		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	30	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	16
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	4		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	30		
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	8	PhD:	33

**MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI TÁMOGATOTT
KUTATÓCSOPORTOK**

MTA–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
honlap: <http://www.mm.bme.hu/~gjd>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A közlekedés biztonságának növelése témakörben elsősorban egy olyan rezgésgerjesztő berendezés kifejlesztése volt a cél, aminek az amplitúdója és frekvenciája egymástól függetlenül állítható, így jól alkalmazható járművekben, veszélyes helyzetekre figyelmeztető jelzések generálására. A berendezés prototípusának legyártása és tesztelése a terveknek megfelelően valósult meg. Fontos cél volt a kerék-talaj kapcsolat pontosabb modellezése is. Ennek keretében a kutatók olyan modellt fejlesztettek ki, mely leírja a gumiabroncs talajjal nem érintkező részein terjedő deformációs hullámokat is. *A közlekedéssel kapcsolatos technológiák termelékenységének növelése* témakörben a marási folyamat frekvencia-tartományon alkalmazható stabilitásvizsgálatához készített program automatizálása és tesztelése volt a kitűzött feladat; az elkészült program szabadon hozzáférhető. A robotok mozgásának szabályozásával kapcsolatban egy kísérleti berendezés építése és egy új kutatási irány művelése, a két lábon járó passzív lépegető robotok vizsgálata kezdődött el. A digitális szabályozások következtében kialakuló rezgések kaotikus voltának bizonyításáról a gyakorlat számára fontos mennyiségi jellemzők számítására és a kerekítés különböző eseteinek egységes tárgyalására tevődött át a hangsúly, az előzetes terveknek megfelelően.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A közlekedés biztonságának növelése témakörben előtérbe került a korábbi elméleti eredmények gyakorlati megvalósítása. A kutatócsoport egyik tagja olyan ún. vibroaktuátor berendezést szabadalmaztatott, mely a megszokott kialakítással szemben nem egy, hanem két excentrikus forgórészt hajtanak meg független elektromotorok. Ezzel a kialakítással lehetőség nyílik a gerjesztett rezgés amplitúdójának és frekvenciájának egymástól független beállítására, ami nagyon jól kiaknázható az ún. heptikus visszacsatolásokban. Ezeknek a kisméretű berendezéseknek az a feladata, hogy rezgések segítségével információt juttassanak el a bőr receptorain keresztül az eszköz felhasználójának, a sokszor amúgy is túlterhelt érzékelési csatornákat (látás, hallás) tehermentesítve. A kidolgozott eszköz segítségével megtöbbszöröződik a rezgések által átadható információ mennyisége, aminek nagy jelentősége lehet számos alkalmazás szempontjából (pl. járművek passzív biztonsági berendezései, mobiltelefonok rezgő jelzése, orvosi/rehabilitációs alkalmazások). 2012-ben elkészült az eszköz prototípusa egy magyar ipari partner segítségével. Jelenleg folyamatban van a szabályozó és kiértékelő szoftverek fejlesztése. A kutatómunka a szabályozás nélküli rendszer viselkedésének vizsgálatára, és szimulációkkal történő összehasonlítására koncentrált. Sikerült bebizonyítani, hogy a korábbi analitikus és numerikus vizsgálatoknak megfelelően kialakul a mechanikai szinkronizáció a két forgórész között akkor is, ha a motorokra kapcsolt feszültségek különböznek egymástól.

A kutatócsoport további fejlesztéseket végzett a kerék-talaj kapcsolat vizsgálata során alkalmazott dinamikus gumikerék modellen. A járműdinamikai szimulációkban használatos összetett kerékmodellek mindegyike figyelembe veszi a gumiabroncs talajjal nem érintkező részeinek deformációját. Némelyik ehhez egyszerű, kvázi-statisztikus esetben érvényes közelítő formulákat alkalmaz, más modellek azonban a dinamikus hatásokat is leírják. Ez utóbbi

modellek bonyolultságuknál fogva nem alkalmazhatók analitikus stabilitásvizsgálatokban. A gumiköpeny deformációját korábban csupán a szakirodalomból ismert közelítő formulák implementálásával vették figyelembe a kutatócsoport tagjai. Az elmúlt időszakban azonban felállították a gumiköpeny azon egyszerűsített modelljét, amely leírja a gumiabroncs talajjal nem érintkező részein terjedő deformációs hullámokat is. A vontatott kerék stabilitásvizsgálatát ennek a modellnek a legegyszerűbb, a kerékköpeny tömegét elhanyagoló változatával végezték el. Nagy vontatási sebességeknél új instabil területeket fedeztek fel, melyek érdekesek lehetnek a repülőgép orrfutók illetve szupersport motorkerékpárok esetén.

A száraz súrlódású rendszerek résztémában folytatódott a harmonikusan gerjesztett Coulomb-súrlódású oszcillátor megoldásainak vizsgálata. Bebizonyosodott, hogy a Ljapunov-exponens értékében tapasztalt hirtelen változás hátterében tranziens kaotikus megoldás létezése áll, mely háromperiódusú megoldáshoz tart. Egy közelítő, szakaszosan lineáris leképezés konstruálásával a kutatók meghatározták a kérdéses paramétertartományon érvényes véges idejű Ljapunov-exponenst, melynek értéke jól illeszkedik a tranziens kaotikus tartományon kívül számolt kitevők sorába.

A közlekedéssel kapcsolatos technológiák termelékenységének növelése témakörben továbbra is fontos cél volt a forgácsoló technológiák fejlesztése. Ennek kapcsán előtérbe került a marási folyamat frekvenciatartományon alkalmazható stabilitásvizsgálata. Az eljárás gyakorlati jelentőségét az adja, hogy alkalmazása során a rendszer dinamikai tulajdonságai megadhatóak a mérésből származó frekvencia átviteli függvény segítségével. A korábban kidolgozott többdimenziós felező módszer és a stabilitásvizsgálat algoritmusának kombinációjával egy hasznos és hatékony programot hoztak létre a kutatók, amely a szokásosan használt stabilitási térképek stabil és instabil szigeteinek automatikus detektálásán kívül számos más dinamikai probléma megoldására is alkalmas. Az elkészített kód – amit már több munkatárs is alkalmazott és tesztelt – nyilvános és ingyenesen letölthető.

Fémek forgácsolása során az ún. élsisak képződése káros mind a felületi minőség, mind a szerszám élettartama szempontjából. Egy késleltetett differenciálegyenleten alapuló modell arra az eredményre vezetett, hogy az élsisak megjelenése gyakran kaotikus rezgésekkel jár együtt. A késleltetett differenciálegyenletek fázistere ugyan végtelen dimenziós, de az állandósult rezgések gyakran véges dimenziójú attraktorra korlátozódnak. A kutatók egy erre a célra írt számítógépes program segítségével kiszámították a Ljapunov-spektrum egy közelítését. Az eredmények alapján becslést lehetett adni az attraktor fraktáldimenziójára, mely a számítások szerint 10 alatti, tehát valóban véges. Az alkalmazott eljárás rendkívül számításigényes, ezért a legnagyobb Ljapunov-exponens értékét egy gyorsabb módszer segítségével is ellenőrizték. Az eredmények lehetőséget teremtenek az eddig véletlenszerűnek tekintett ingadozások determinisztikus modellek alapján történő magyarázatára.

A robotok mozgásának szabályozásával kapcsolatos munka keretében folytatódott az alulaktuált, azaz nem minden szabadsági fokukban szabályozható robotikai rendszerek szabályozásának tanulmányozása. Napjaink ipari robotjaiban minden egyes csukló motorral mozgatható. Így nagy pontosság érhető el, azonban az így megvalósított mozgás sok energiát emészt fel. Gyakran a pontosságnál fontosabb szempont, hogy a robot kicsi, fürge és energiatakarékos legyen. Az ilyen robotok gyakran alulaktuáltak, ezért ebben az esetben az úgynevezett passzív szabadsági fokok természetes dinamikáját kell előnyösen kihasználni. A témához kapcsolódó új kutatási irány a két lábon járó passzív lépegető robotok vizsgálata. Ezek a robotok nem próbálnak állandóan statikus egyensúlyban maradni, sok energiát felemésztve, hanem az emberi járáshoz hasonló módon dinamikusan lendülnek át egyik lábukról a másikra. Ennek megfelelően, előtérbe került az emberi járás tanulmányozása is, elsősorban az energiahatékonyság szempontjából. Emellett a beszámolási időszak második felében kísérleti berendezés építése kezdődött, mely a tervek szerint egyaránt alkalmas lesz a projektben vizsgált kontaktproblémák és az alulaktuált robot szabályozás vizsgálatára is.

A robotok mozgásának szabályozását számítógépes rendszerek biztosítják, melyek az ún. digitális hatások következtében kis amplitúdójú kaotikus rezgésekhez vezethetnek. Az eddigi kutatások a létrejövő rezgések kaotikus voltának bizonyítására koncentráltak néhány egyszerű esetben. A beszámolási évben megmutatták a kutatók, hogy a kaotikus viselkedés három ismérve közül a kezdeti feltételekre való érzékenység és az attraktor létezése digitálisan szabályozott rendszerek széles osztályára teljesül, míg az ún. keverési tulajdonság bizonyítása nem triviális. Az eredmények rávilágítottak, hogy a gyakorlatban nem a digitális szabályozás miatt bekövetkező kis amplitúdójú rezgések okozhatnak problémát, hanem az, hogy több különálló attraktor is megjelenhet, távol a megkívánt véghelyzettől, rontva a szabályozás pontosságát. A kutatómunka keretében célprogram készült a fázistér globális szerkezetének ún. cella-leképezés segítségével történő feltérképezésére, mellyel sikerült kimutatni az elkülönülő attraktorokat. Az eredmények általánosítása érdekében elkezdődött a kimeneten és bemeneten történő kerekítés hatásainak egységes formalizmus keretében történő leírásának kidolgozása is.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai érdekes mechanikai kísérletek bemutatásával és ismeretterjesztő előadás tartásával vettek részt a BME egyetemi nyílt napon. A BME-n tartott Kármán-napon is ismeretterjesztő előadással és mechanika témájú vetélkedő feladatok kidolgozásával vettek részt a kollégák. A Mathias Corvinus Collegium előadássorozatának keretében is előadást tartott egy kutató.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

- *Új felsőoktatási kapcsolat:* Egy kutató külföldön (Centre for Intelligent Machines, Department of Mechanical Engineering, McGill University) végzett kutatómunkát.
- *Nemzetközi konferenciák szervezése:* ICTAM 2012, Prenominated Session: Mechanics of Material Processing
- *Új tudományos tagságok:* IUTAM, Executive Congress Committee
- *Új ipari kapcsolatok:* Direct-Line Kft.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2012-ben „Tyre induced self-excited vibrations of vehicles” címmel 3 éves, 4.600 E Ft költségvetésű OTKA pályázatot nyert el a kutatócsoport egyik tagja.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Denkena B, Krüger M, Bachrathy D, Stépán G: Model based reconstruction of milled surface topography from measured cutting forces. International Journal of Machine Tools & Manufacture, 54-55: 25-33 (2012)
2. Takács D, Stépán G: Micro-shimmy of towed structures in experimentally uncharted unstable parameter domain. Vehicle System Dynamics, 50:(11) 1613-1630 (2012)
3. Kovács LL, Bencsik L: Stability case study of the ACROBOTER underactuated service robot. Theoretical and Applied Mechanics Letters, 2:(4) 7 p. 043004 (2012)
4. Zelei A, Stépán G: Case studies for computed torque control of constrained underactuated systems. Periodica Polytechnica – Mech. Eng., 56(1): 73-80 (2012)
5. Szabo Zs, Zelei A, Stépán G: Stability of an elastic supported flat plate subjected to potential flow. Periodica Polytechnica – Mech. Eng., 56(2): 99-103 (2012)

MTA–BME IRÁNYÍTÁSTECHNIKAI KUTATÓCSOPORT

Vajk István, az MTA doktora
1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2. Q/B206
telefon: (1) 463 2870; fax: (1) 463 2871
e-mail: vajk@aut.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A kutatócsoport új tudományos eredményeket kíván elérni komplex, többváltozós lineáris, változó paraméterű lineáris, nemlineáris és hibrid dinamikus rendszerek modellezése és irányítása terén. Az eredményeket alkalmazni kívánja energetikai rendszerekben, összetett folyamatrendszerekben, légi és földi járművek irányításában, robotok irányításában.

A folyamatok valós viselkedését jól közelítő nemlineáris dinamikus modellek meghatározására robusztus identifikációs eljárásokra van szükség. Az irányításelmélet és rendszeridentifikáció eszköztára egy rendkívül hatékony eszközzel, a szemidefinit programozással (SDP) bővült. Ennek alkalmazásával olyan becslési módszerek kidolgozását célozták meg, amelyek a rendszerek bizonytalanságát is modellezik.

A nemlineáris rendszerek sokszor közelíthetők ún. LPV lineáris paraméterfüggő rendszermodellel. Járművek modellalkotásának, irányításának, hibadiagnosztikájának problémáit kívánják ebben a megközelítésben tárgyalni.

A robotok fejlesztésében új irányzatot jelent az eto-robotika, ami az ember-intelligens robot kapcsolatát új, etológiai indíttatású alapokra helyezi. Ebben az irányban kívánnak kutatást-fejlesztést végezni.

A teljesítményelektronikában vizsgálják, hogy mikor kell a bonyolultabb diszkrét-idő térképezés módszert alkalmazni, illetve mikor elégséges az átlagoláson alapuló linearizálás a bifurkációk megállapítására nemlineáris rendszerekben.

A folyamatrendszerek osztályán belül komplex energetikai rendszerekkel foglalkoznak, amelyekben az egyes berendezések lokális nemlineáris szabályozóinak tervezése és optimális felügyelő stratégiáinak kifejlesztése a cél. Hibadiagnosztikai rendszereket dolgoznak ki.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Magas színvonalú irányításelméleti szakkönyv készült el, amely 70-80%-ban saját kutatási eredményeket tartalmaz. Önálló megközelítésben tárgyalja a kétszabadságfokú rendszerek parametrizálását, modellezését, identifikációját és optimalizálását. A könyv az MSc és PhD képzésben használható.

A rendszeridentifikáció területén új eredményeket értek el a szemidefinit programozás (SDP) alkalmazásával. Kidolgoztak egy az összes stabilizáló controller előállítására illetve parametrizálására szolgáló algoritmust LPV rendszerekre alkalmazva.

Az *irányítástechnikai alkalmazások* területén az UAV (Unmanned Aerial Vehicles) légi járművekhez intelligens megbízható aktuátorokat fejlesztettek ki. Algoritmust fejlesztettek ki repülőgépek útvonal követő szabályozására. Új repülőgép hibadiagnosztikai eljárást adtak meg. A formációban haladó légi járművek garantáltan ütközésmentes pályatervezésére új

módszert dolgoztak ki. Új módszert fejlesztettek ki mobil robotok helyzetfelismerésére. Szabályozótervezési módszert adtak meg a járművezetést támogató rendszerek kidolgozására. Autonóm járműoszlopok szabályozásához meghatározták a biztonságos minimális követési távolságokat a fogyasztás csökkentése és a forgalomsűrűség növelése érdekében.

Az embert kiszolgáló robotok fejlesztésében az MTA-ELTE Összehasonlító Etológia Kutatócsoporttal együttműködve elkészült egy eto-robot ikerpár hardver része.

Nagy sebességű villamos hajtások vizsgálatánál kimutatták, hogy az iparban széles körben alkalmazott Field Oriented Control stabilitási tartományára a Pulzus Szélesség Modulációs technikák mintavételezési eljárásai jelentős hatással vannak.

A nemlineáris folyamatrendszerek irányítása területén fontos speciális pozitív rendszerosztály, a polinomiális jobboldalú differenciálegyenletekkel leírható úgynevezett reakciókinetikai hálózatok osztályának realizációs problémáit vizsgálták. Optimalizációs módszereket dolgoztak ki ezen rendszerek gyengén reverzibilis realizációinak hatékony előállítására. A hibrid folyamatrendszerek leírására színes időzített Petri háló (CPN) modelleket használtak molekuláris jelátvivő hálózatok (cell signalling pathways) modell struktúrájának validálására.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai részt vesznek a BME-n, a Pannon Egyetemen, a Széchenyi István Egyetemen és a Debreceni Egyetemen az irányítástechnika oktatásában és a doktori képzésben. A BME Automatizálási és Alkalmazott Informatikai Tanszéken (AAIT) megrendezésre került az AACS'12 Automation and Applied Computer Science Workshop PhD-konferencia.

A ROBONAUT verseny a Robotirányítás tárgy keretében került megrendezésre az AAIT Tanszéken. A hallgatók robotautók irányítását tervezték meg és robotjaik teljesítményét mérték össze a versenyen. Az esemény sok nézőt vonzott és jelentős média visszhangja is volt. Motiválhatja a pályaválasztás előtt álló fiatalokat a mérnöki pálya választásában. Erről az oktatási formáról beszámoltak az ACE (Advances in Control Education) IFAC konferencián.

2012. november végén az IEEE világszervezet 1000 USD támogatásával IES (Industrial Electronics Society) Chapter összejövetel megrendezésére került sor kb. 50 fő részvételével. A Kutatók Éjszakája rendezvénysorozat keretében az Eto-robotika előadás kb. 100 fős hallgatóságot vonzott.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A kutatócsoport tagjai részt vesznek az IFAC (Int. Federation of Automatic Control) több műszaki bizottságának munkájában. A kutatócsoport egyik tagja a European Power Electronics and Motion Control Council elnöke, a CIGRE (párizsi székhelyű szervezet) Magyar Nemzeti Bizottságának elnöke, az IEEE William E. Newell Award Committee tagja.

A japán Hanbat National University, Dept. of Instrumentation and Control Engineering tanszékéről egy kutató professzor egy éves sabbatical periódusát tölti Magyarországon, részben a kutatócsoporthoz kapcsolódóan.

A folyamatrendszerek modellezése és irányítása témakörében közös kutatás folyik ausztrál és spanyol professzorokkal (University of Queensland, Brisbane, Australia és Process Control Group, IIM CSIC, Vigo, Spain).

2011 őszén a Pozsonyi Műszaki Egyetemről egy PhD-hallgató 3 hónapot töltött a kutatóhelyen. A közös kutatás 2012-ben folytatódott és több közös cikk jelent meg.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA-pályázat: Bifurkációk kutatása a teljesítményelektronikában és mozgásszabályozásban, 2012–2015, K 100275.

Az Európai Unió által támogatott „SustEner” pályázat, CZ/11/LLP-LdV/TOI/1340. Címe: „Az energia oktatása a fenntartható világ számára”.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Keviczky L, Bányász Cs: Két-szabadságfokú irányítási rendszerek. Universitas-Győr Non-profit Kft. 420 p. (ISBN: 978-963-9819-82-5) (2012)
2. Keviczky L, Bányász Cs: Nonlinear model structure identification based on kernel visualization. Worldcomp'12 MSV, Las Vegas, USA, 65-69 (2012)
3. Kolumbán S, Vajk I, Schoukens J: Approximation of confidence sets for output error systems using interval analysis. Journal of Control Engineering and Applied Informatics, 14: (2) 73-79 (2012)
4. Szederkényi G, Hangos KM, Tuza Z: Finding weakly reversible realizations of chemical reaction networks using optimization. MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 67: 193-212 (2012)
5. Stumpf P, Járdán RK, Nagy I: Subharmonics generated by space vector modulation in ultrahigh speed drives. IEEE Transactions on Industrial Electronics, 59 (2): 1029-1037 (2012).
6. Stumpf P, Járdán RK, Nagy I: Analysis of the impact of space vector modulation techniques on the operation of ultrahigh speed induction machines. Mathematics and Computers in Simulation, Elsevier, September 2012, p.13. (2012)
7. Gáspár P, Szabó Z: LPV Design of fault-tolerant control for road vehicles. International Journal of Applied Bokor Mathematics and Computer Science, 22 (1): 173-182 (2012)
8. Gáspár P, Németh B, Bokor J: Design of an LPV-based integrated control for driver assistance systems. 7th IFAC Symposium on Robust Control Design. Aalborg, Denmark. June 20-22. 511-516 (2012)
9. Regula G, Gőzse I, Soumelidis A: Position Estimation Using Novel Calibrated Indoor Positioning System. IEEE International Instrumentation and Measurement Technology Conference (I2MTC 2012) Proceedings. Graz, Ausztria, 2012.05.13-2012.05.16. (IEEE IMS), pp. 1142-1147. (ISBN: 978-1-4577-1772-7) (2012)
10. Korondi P, Farkas Z, Fodor L, Illy D: Aesthetic Marker design for home robot localization. 38th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society (IECON 2012). Montreal, Canada, October 25-28. 5510-5515 (2012)

MTA–BME KONDENZÁLT ANYAGOK FIZIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Mihály György, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 1-3.
telefon: (1) 463 2312; fax: (1) 463 4180
e-mail: mihaly.gyorgy@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A kutatócsoport a BME Fizikai Intézetének kísérleti és elméleti háttérére támaszkodva olyan új fizikai jelenségeket tanulmányoz, amelyek az alapkutatási jelentőségük mellett az alkalmazások lehetőségét is magukban hordozzák. Kitüntetett szerepet játszik a nanométer mérettartományú szerkezetekben megvalósuló elektromos vezetési tulajdonságok vizsgálata: a nanotechnológiai eljárásokkal épített szerkezetek spin-polarizált elektrontranszportja, az atomi önszerveződés folyamatát is kihasználó molekuláris elektronika, valamint a grafén-alapú elektronika. A csoport kutatásai kiterjednek a komplex spin rendeződést mutató anyagok mágneses és magneto-optikai vizsgálatára.

A 2012. év egyik legfontosabb feladata volt az alacsony hőmérsékletű és nagy mágneses terű eszközpark jelentős fejlesztése, a nagyfrekvenciás ESR spektrométer korszerűsítése, a polarizációs magneto-optikai spektrométer és a pásztázó üzemmóddal bővített pont-kontaktus berendezés üzembe helyezése. A laboratóriumi fejlesztéseket a BME Kutatóegyetemi Programja, két ERC projekt és egy nagy-összegű CNK OTKA-pályázat finanszírozta.

A kutatócsoporti támogatás lehetőséget biztosított a saját nevelésű doktorjelöltek alkalmazására, a kutatási területen kialakított tudományos iskola fiatalokkal való erősítésére. A folyamatosság biztosítására a kutatócsoport tagjai TDK- és diplomamunka, valamint PhD-témavezetői feladatokat is ellátnak.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő tudományos eredmények

A kutatócsoport munkatársai kimutatták, hogy mágneses anyagok esetén az elektronok impulzus momentuma (spinje) is eredményezhet kiralitást. A kísérletekben alkalmazott speciális mágneses kristály különlegessége, hogy külső mágneses tér alkalmazásával a jobb- és balkezes módosulatai egymásba alakíthatók, szemben a szerves molekulák szerkezetből adódó kiralitásával. A Tokiói Egyetemmel közösen végzett vizsgálatok egy új optikai effektus felfedezéséhez is vezettek: királis mágneses kristályok optikai egyenirányítóként működnek; a mágnesezettséggel párhuzamosan, egymással ellentétes irányban terjedő fénynyalábok közül az egyiket a kristály elnyeli, míg a másik gyengítés nélkül halad tovább. A mágneses tér megfordításával az elnyelő és az átlátszó terjedési irányok felcserélhetők. A kutatók által megfigyelt, szokatlanul erős (közel 100 %-os) magneto-királis effektus ígéretes mérőföldkő az ilyen anyagok mágneses térrel kapcsolható optikai egyenirányítóként történő alkalmazásában. Az eredmények a rangos Nature Physics folyóiratban jelentek meg.

A 2012-es év egyik komoly laboratóriumi fejlesztése volt egy nagystabilitású, magas frekvenciás (~1GHz) mérésekre is alkalmas szobahőmérsékletű pontkontaktus mérőrendszer építése. A berendezéssel rezisztív kapcsolási jelenségek dinamikáját vizsgálták ezüst-szulfid alapú memrisztorokon. Az eredmények arra utalnak, hogy a kapcsolat szokatlan, ún. nem-exponenciális relaxációt mutat, ugyanakkor a memóriaelemként működő pont-kontaktusok 10

ns-nál gyorsabb kapcsolásra is alkalmasak. Az atomi méretű pont-kontaktusok minősítésére kifejlesztettek egy új statisztikai módszert, melynek segítségével atomi és molekuláris kontaktusokban kialakuló konfigurációk közötti korrelációk vizsgálhatók. A módszer segítségével számos atomi és molekuláris nanovezeték viselkedését sikerült a szokásos vezetőképesség-hisztogram technikánál részletesebben feltérképezni.

Polikristályos $Gd_3N@C_{80}$ elektronspin-rezonancia vizsgálatai megmutatták, hogy a három ferromágnesesen csatolt Gd^{3+} ion óriási paramágneses spint ($S=21/2$) hoz létre. Az ESR spektrumok hőmérsékletfüggése felveti, hogy a Gd_3N molekulák egy jelentős része még 10–20 K hőmérsékleten is – rendezetlenül – forog a szilárd fázisú $Gd_3N@C_{80}$ -ban. Ez a mozgás nagymértékben befolyásolja a molekula mágneses alapállapotát és dinamikáját, felveti a lehetőségét egy MRI-diagnosztikában is használható, nagy szelektivitású $Gd_3N@C_{80}$ -vegyület kifejlesztésének.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tudományos eredményeiből 2012-ben 17 közlemény jelent meg nívós nemzetközi folyóiratokban (az impakt-faktor összeg: 98,02, az átlagos impakt faktor: 5,77). A jelenségorientált alapkutatások nagymértékben hozzájárulnak a tudományterület fejlődéséhez, viszont elvont jellegük miatt a laikusok számára kevésbé követhetőek. Ugyanakkor egy-egy tudományos felismerés olyan közvetlen alkalmazási lehetőséget is felvet, amelynek jelentősége szélesebb körben is megítélhető. Az előző alfejezetben kiemelt eredmények mindegyike ilyen: a magnetokirális effektus ígéretes lehetőség a THz-es adatátvitel megvalósítására, a kísérletekben létrehozott memrisztor új típusú adattárolást tesz lehetővé, míg a fullerén-alapú óriási paramágneses momentum az orvosi diagnosztikában kerülhet alkalmazásra.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Nanoszerkezetek készítése terén a kutatócsoport tovább erősítette kapcsolatát az MTA TTK MFA intézményével: egy új, tisztatér környezetbe elhelyezett laboratórium kiépítését kezdték meg a csillebérci telephelyen. A fejlesztés célja, hogy az elektron sugaras és optikai litográfiával készített nanoszerkezetekkel foglalkozó kutatóknak egy közös labort biztosítson. A két intézmény a berendezéseit ebben a közös laboratóriumban helyezte el. 2012-ben a labor eszköztára egy új UHV vékony réteg leválasztó rendszerrel bővült, ami képes porlasztással illetve elektron sugaras gőzöléssel nagy tisztaságú fém rétegek leválasztására.

2012-ben épült ki kapcsolat a Columbia University (USA) és a Lancaster University (UK) kutatóival, akik a nanoelektronikai kísérletek elméleti modellezéshez járultak hozzá.

SCIEX NMS svájci–magyar tudományos csereprogram elnyert posztdoktori ösztöndíj tovább erősíti a kutatócsoport kapcsolatát a Baseli Egyetem Nanocentrumával. A közös munka ferromágneses analizátor nanoáramkörök fejlesztésére és minősítésére koncentrál.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok

NMP3-SL-2012-281043 Multiscale Modelling of Femtosecond Spin Dynamics (Femtospin), 2012–2015, teljes EU támogatás 356 356 Eur (~100 M Ft)

Téma: Ultragyors lézerimpulzus hatására bekövetkező femtomásodperc időskálájú mágnesesodási folyamatok kísérleti és elméleti vizsgálata, a ‘teljes optikai’ mágneses tárolás

technológiai fejlesztés támogatása. A BME partner feladata az elméleti spin-dinamika szimulációk ab-initio háttérének biztosítása (spin-model alkotás) és részvétel a korrelált rendszerek erősen nem-egyensúlyi spin-dinamika elméletének számítógépes adaptálásában.

OTKA K105735, Elektronsugár litográfia felbontásánál kisebb nanoáramkörök vizsgálata – 2012.09.01 – 2016.08.31, támogatási összeg 26,9 M Ft

Téma: a nanolitográfia felbontásánál kisebb nanoszerkezetek létrehozására alkalmas eljárások kifejlesztése, illetve ezen szerkezetek önszerveződő viselkedésének és vezetési tulajdonságainak kísérleti vizsgálata. Reaktív fémek és grafén elektródák bevezetésével, illetve ionos vezetőkön alapuló atomi méretű rezisztív kapcsolók fejlesztésével az alkalmazások szempontjából perspektivikus atomi méretű nanoszerkezeteket létrehozása.

OTKA K107228 Spintronikai anyagok elektronspin-rezonanciája 2012.06.01 – 2016.05.31, támogatási összeg 18,959 M Ft

A projekt spintronikus anyagok elektronspin-rezonancia vizsgálatár tűzi ki célul. A spintronika rendkívül dinamikus fejlődő kutatási terület, melynek fő témája az elektronspin relaxációjának és diffúziójának vizsgálata, valamint manipulálásának és detektálásának fejleszthetőségei. E terület fő hajtóereje egyfajta „új elektronika” kifejlesztése, amelyben az információt elektronspin kódolják és dolgozzák föl az elektronok töltése helyett.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bordacs S, Kezsmarki I, Szaller D, Demko L, Kida N, Murakawa H, Onose Y, Shimano R, Room T, Nagel U, Miyahara S, Furukawa N, Tokura Y: Chirality of matter shows up via spin excitations. *Nature Physics*, 8:(10) 734-738 (2012)
2. Makk P, Tomaszewski D, Martinek J, Balogh Z, Csonka S, Wawrzyniak M, Frei M, Venkataraman L, Halbritter A: Correlation Analysis of Atomic and Single-Molecule Junction Conductance. *ACS NANO*, 6: 3411-3423 (2012)
3. Penc K, Romhányi J, Room T, Nagel U, Antal A, Feher T, Janossy A, Engelkamp H, Murakawa H, Tokura Y, Szaller D, Bordacs S, Kezsmarki I: Spin-Stretching Modes in Anisotropic Magnets: Spin-Wave Excitations in the Multiferroic Ba₂CoGe₂O₇. *Physical Review Letters*, 108:(25) 5, 257203 (2012)
4. Demko L, Bordacs S, Vojta T, Nozadze D, Hrahsheh F, Svoboda C, Dora B, Yamada H, Kawasaki M, Tokura Y, Kezsmarki I: Disorder promotes ferromagnetism: Rounding of the quantum phase transition in Sr_{1-x}Ca_xRuO₃. *Physical Review Letters*, 108:(18) 185701-185705 (2012)
5. Náfrádi B, Antal Á, Pásztor Á, Forró L, Kiss LF, Fehér T, Kováts E, Pekker S, Jánossy A: Physical Processes in Nanomaterials and Nanostructures Molecular and Spin Dynamics in the Paramagnetic Endohedral Fullerene Gd₃N@C₈₀. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 3: (22) 3291-3296 (2012)

MTA–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
honlap: <http://aak.bme.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Szintetikus receptorok

Érzékelés és elválasztás funkcionális nanoszerkezetekkel

Számítógépes modellezés

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szintetikus receptorok

Originális aptamerek

Miután a korábbi kísérletek szívizomból származó *troponin I fehérjére* (TNNI3) szelektív aptamerek előállítása sikertelenek voltak, új megközelítést alkalmaztak. Az aptamerek nukleáz rezisztens alternatíváit az L-dezoxiribózból felépülő Spiegelmereket állították elő, melyek szelektiója a célfehérje megfelelően kiválasztott szekvencia részletének (28-37 régió) tükörképi párja, a D aminosavakból felépülő peptid felhasználásával történt. A D-peptidet mágneses gyöngyöz immobilizálták, majd elvégezték a Spiegelmer szelektió lépéseit. A szelektált Spiegelmer ALPHAScreen és felületi plazmon rezonancia mérés alapján differenciál a vázizom, illetve szívizom specifikus TNNI fehérjék között. *Vírusokra* specifikus aptamerek szelektálását inaktivált poliovírus törzsek segítségével végezték. Elsőként a vírusok kapilláris elektroforézissel történő szeparációjára dolgoztak ki eljárást, majd a vírusokat aptamer könyvtárral keverték össze, és ily módon szelektálták a vírus szelektív aptamereket.

Peptidnukleinsavak

A *Streptococcus Pneumoniae*-re jellemző DNS szál és a szívinfarktus diagnosztikájára alkalmas mikroRNS detektálására megtervezték az ezeket szelektíven megkötő és Au felületre immobilizálható peptidnukleinsav (PNS) láncokat. A PNS szálak stabilabb komplexet képeznek a komplementer DNS vagy RNS szekvenciákkal, mint a hagyományos DNS-ek és az érzékelés szempontjából is előnyösebbek, mivel semlegesek. A fluorszcencia polarizációs mérések bizonyították, hogy a PNS szálak nagy affinitással és szelektivitással kötődnek a komplementer DNS szálakhoz.

Molekuláris lenyomatú polimerek

Továbbfejlesztették a nanoszféra litográfias eljárást, mely fehérje szelektív, felületi molekuláris lenyomatú poli(3,4-etiléndioxitiofén) (PEDOT) polimer réteget képez. A polisztirol (PS) nanorészecskék avidinnal való módosítására reverzibilis kötést alkalmaztak, így a polimerréteg kialakítása után lehetővé vált az avidin eltávolítása, amely nagyban megkönnyítette a PS kioldását. A kvarckristály-mikromérleg mérésekkel kimutatták, hogy az imprintelt struktúrán a referencia polimerrel összevetve 6-szor nagyobb volt a megkötött avidin mennyisége, továbbá a MIP szelektívnek bizonyult más fehérjékkel szemben.

Új ionoforok és szelektív komplexképzők

Új 5,5-dioxidofenotiazin-1,9-diacetamid és -dibenzamid receptor molekulákat állítottak elő kereskedelembe kapható, olcsó kiindulási anyagokból. A klorid ion hidrogén-hidas komplexet képzett a diacetamid receptorral, míg a fluorid, az acetát és a dihidrogén foszfát anionok mindkét szenzor molekulát deprotonáltak. Fluorid ionnal történő titrálás során a

deprotonálódás $[\text{HF}_2]^-$ kialakulásával ment végbe, a diacetamid receptor deprotonálódását komplexképződés is kísérte.

Nanotechnológiai eljárásokkal előállított szelektív felismerésre alkalmas nanoszerkezetek, nanokompozitok

A WO_3 az egyik legfontosabb félvezető-oxid katalizátor a fotokatalízisben. Először sikerült felderíteniük, milyen hatást gyakorol a fotokatalízisre a WO_3 összetétele (oxidált vagy részlegesen redukált) és kristályszerkezete (monoklin (m-) vagy hexagonális (h-)). Kimutatták, hogy a legjobb fotokatalizátor az oxidált m- WO_3 , és ezt követi az oxidált h- WO_3 . A redukált h- WO_3 és m- WO_3 aktivitása lényegesen kisebb. Így a TiO_2 -vel szemben, ahol a kristályszerkezet a döntő a fotokatalízis szempontjából, a WO_3 esetében az összetétel a lényeges: minél oxidáltabb egy WO_3 minta, annál jobb fotokatalizátor.

Nanoszféra litográfias technikát alkalmaztak PEDOT vezető polimer két- illetve háromdimenziós nanomintázására. Templátként 1-30 rétegben hexagonálisan rendezett PS nanorészecskéket használtak. A köztük levő teret vezető polimerrel töltötték ki. Az így kialakított „üreges” vezető polimert szilárd belső elvezetésű ion-szelektív elektródok ion-elektron átviteli rétegeként használták a felület és ezáltal a kapacitás növelése céljából, ez ugyanis előnyösen az elektródok hosszú távú stabilitására.

Érzékelés és elválasztás funkcionális nanoszerkezetekkel

Nanopórusok vírusok számlálására és meghatározására

Poliovírusok nanopórusos számlálására a nanopórusos membránok helyett alacsony zajjal rendelkező kvarc nanopipettákat használtak. Kezdetben a vírusok helyett nanorészecskékkel való számlálási kísérleteket végeztek, melynek során a detektálható részecskeméretet a vírusok méretének (átmérő 27-30 nm) megfelelő tartományba csökkentették, majd az ilyen részecskék érzékelésére alkalmas pipettákkal próbálkoztak meg a vírusdetektálással.

Fehérjék és nukleinsavak meghatározása nanopórusokkal és nanokavitásokkal

A szilárdtest nanopórusos érzékelők fejlesztésénél többféle módszert összehasonlítva kiválasztották az Au felületek biofunkcionalizálásához optimális tisztítási és felületkezelési eljárásokat. Eljárást dolgoztak ki az aptamerek, illetve a PNS-ek aranyfelületre történő rögzítésére önrendeződő monomolekuláris rétegek kialakításával. A nem specifikus kötődést optimalizált összetételű önrendeződő rétegekkel csökkentették. Ez alapján arany nanopórusokat módosítottak a receptorokkal. A módosítást impedancia spektroszkópiával és egy általuk bevezetett potenciometriás módszerrel igazolták, amely alkalmas a felületi töltéssűrűség megállapítására. Vizsgálták a nem-specifikus adszorpció hatását a módosított nanopórusok ellenállás változására különböző hígítású vészérum minták és felületi módosítások esetében. Az előzetes eredmények alapján még a legkisebb, nyolcszoros hígítás esetében sem tapasztaltak 10 %-nál nagyobb ellenállás növekedést, ami a nanopórus platform inherens szelektivitását sugallja.

Számítógépes modellezés

Modellezés a kísérleti munka támogatására

Lipid membránok vizsgálata: Vizsgálták négy anesztetikus hatású molekula (kloroform, halotán, enflurán, dietiléter) tulajdonságait lipid membránokban. Ennek során tisztázták, hogy a felületi sűrűség, és a lipid láncok lokális rendezettsége ellentétesen változik az anesztetikumok hozzáadása illetve a nyomás emelése során, ami magyarázhatja az anesztetikus hatást, illetve e hatás nagy nyomáson való megszűnését.

Modellezés elméleti kérdések vizsgálatára

Fluid határfelületek vizsgálata: Megvizsgálták egy új, a molekulák polarizációját explicit módon is figyelembe vevő vízmodell (BK modell) határfelületi tulajdonságait. Az új modell a

korábbiaknál pontosabban képes egyszerre reprodukálni a felületi feszültséget és annak hőmérsékletfüggését, a víz gőz-folyadék egyensúlyát, valamint kritikus pontját. A víz felületi rétegének molekulái között szobahőmérsékleten meglévő laterális, kétdimenziós perkoláló hidrogénkötéses háló jóval (kb. 200 K-nel) a kritikus pont alatt szétesik, azon hőmérséklet közelében ahol a felületi feszültség hőmérsékletfüggése inflexiós pontot mutat.

Szilárd határfelületek vizsgálata: Acetaldehid adszorpciójának vizsgálata jég felületén magasléghőmérsékletű körülmények között azt mutatta, hogy az acetaldehid és vízmolekulák között létrejövő hidrogénhid-kötések mellett a szomszédos acetaldehid molekulák közötti dipoláris kölcsönhatás is jelentős mértékben hozzájárul az adszorpció hajtóerejéhez.

Tömbfázisú folyadékok vizsgálata: megállapították, hogy az acetonnak egy új modellje (PAC modell) a TIP5P-E vízmodellel kombinálva képes az aceton-víz elegy korlátlan elegyedésének reprodukciójára, sőt nagy pontossággal képes reprodukálni az egyes termodinamikai mennyiségek (energia, entrópia, szabadenergia) elegyedést kísérő változását.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport intenzíven foglalkozik a magyar társadalmat aktuálisan foglalkoztató problémával, az orvosdiagnosztikai eljárások olcsóbbá tételével

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Kutatási együttműködések: 1,5 hónap, University of Helsinki (Finnország) (Marie Curie Intra-European Fellowship); 1 hét AGH University (Krakkó, Lengyelország) (TÉT-pályázat). Szűcs Júlia: 3 hónap Abo Akademi University (Finnország) (Finn és Magyar Tudományos Akadémia bilaterális együttműködése).

Nemzetközi konferenciák szervezése: EMLG2012 (2012 Annual Meeting of the European Molecular Liquids Group and Japanese Molecular Liquids Group), konferencia helye és ideje: Eger, 2012. szept. 5–9.

Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok: Szerződéses K+F munkákat végzünk a TEVA Magyarország Zrt., a GE, a LightTech, a Jabil és a Johnson Electric cégek részére.

Oktatás egyetemeken: A csoport minden tagja aktívan oktat a BME-n, illetve két tagunk az ELTE-n, az SE-n és az Eszterházy Károly főiskolán.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

„Kis molekulák asszociációs folyamatainak vizsgálata fluid fázisok határfelületén és belsejében” (OTKA-pályázat). „Molecularly imprinted magnetic nanoparticles for selective protein recognition” (OTKA-pályázat): A pályázat fehérjék szelektív meghatározására szolgáló MIP-eken alapuló homogén mágneses assay-k kidolgozását célozza.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Hofler L, Gyuresanyi RE: Nanosensors lost in space. A random walk study of single molecule detection with single-nanopore sensors. *Analytica Chimica Acta*, 722: 119-126 (2012)
2. Szilágyi IM, Fórizs B, Rossler O, Szegedi A, Németh P, Király P, Tárkányi G, Vajna B, Varga-Josepovits K, László K, Tóth AL, Baranyai P, Leskelä M: WO₃ photocatalysts: Influence of structure and composition. *Journal of Catalysis*, 294: 119-127 (2012)
3. Darvas M, Hoang PNM, Picaud S, Sega M, Jedlovszky P Anesthetic molecules embedded in a lipid membrane: a computer simulation study *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14:(37) 12956-12969 (2012)

MTA–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 2012-ben

A kutatócsoport tagjai 2012-ben az alábbi főbb területeken dolgoztak:

- vizsgálták a poláris fémorganikus vegyületek alkalmazását újszerű regio- és sztereoselektív reakciókban,
- tanulmányozták a foszfororganikus vegyületek újszerű előállítási lehetőségeit,
- folytatták az optikailag aktív vegyületek előállítási lehetőségeinek kutatását,
- tanulmányozták a heterogén katalitikus reakciók és a mikrohullámú aktiválás alkalmazási lehetőségeit.

A csoport és a befogadó tanszék közötti megállapodással összhangban a kutatók részt vettek a tanszék oktatási munkájában előadások, laboratóriumi gyakorlatok vezetésével, BSc- és MSc-diplomamunkák, TDK-dolgozatok készítőinek témavezetésével. A csoport tagjai által irányított témákban 14 szakdolgozat és diplomamunka készült el. Egy fiatal kutató sikeresen megvédte PhD-értekezését 2012-ben. A csoportvezető, illetve a csoport egyik tagja az elmúlt évben a sikeresen megvédett PhD-értekezés témavezetése mellett négy PhD-hallgató témájának irányítójaként is tevékenykedett.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

1-Fenilpirrol-származékokból kiindulva optikailag aktív dikarbonsav-származékokat állítottak elő, majd vizsgálták ezen vegyületek további kémiai átalakítási lehetőségeit. Egy új, diasztereoselektív úton előállított, axiális és centrális kiralitást is tartalmazó termék abszolút konfigurációját egykristály röntgendiffrakciós módszerrel meghatározták. Vizsgálták néhány intermedier sztereokémiai stabilitását is. A kísérleti tapasztalatok értelmezéséhez együttműködés keretében molekulamodellzési számításokat indítottak. Az optikailag aktív dikarbonsavakból szelektív monoészterestést követő savamidképzéssel majd borános redukciókkal számos új, optikailag aktív aminoalkohol-származékot szintetizáltak. Az optikailag aktív aminoalkoholokat aromás aldehidek és dietil-cink enantioselektív addíciós reakciójában tesztelték katalizátor ligandumként. Megállapították, hogy néhány új ligandum 1-5 mol%-nyi mennyiségben is igen hatékonyan segíti elő az addíciós reakciót, teljes konverzió mellett ee: 92-94%-os enantiomerfelesleggel kapták az 1-arylpropanol típusú termékeket.

Új, optikailag aktív oxiránszármazékokat szintetizáltak és ezekből kiindulva új optikailag aktív azetidint is előállítottak. Emellett ipari megbízás keretében új eljárásokat dolgoztak ki egy optikailag aktív gyógyszerintermedier előállítására, valamint a királis intermedier nikkellel katalizált C-C kapcsolási reakcióval történő továbbalakítására.

Folytatták a foszfortartalmú CH-savas vegyületek C-alkilezésének tanulmányozását mikrohullámú besugárzás és esetlegesen fázistranszfer katalízis alkalmazása mellett. Vizsgálták a tetrafenil-metilénbiszfoszfin-oxid, dietil-1-cianometilfoszfonát és a trietilfoszfonoacetát reakcióit.

Kísérleteket végeztek a csonttrikulás kezelésében fontos ibandronsav és alendronsav előállításának környezetbarátabbá tételére. Megállapították, hogy a reakcióhoz ezeknél a

vegyületeknél sincs szükség az általában alkalmazott foszforosav reagensre. Megkezdték további biszfoszfonátok előállításának vizsgálatát.

Környezetbarát módszert dolgoztak ki *H*-foszfonátok (dialkil-foszfitok) alkoholízisének megvalósítására mikrohullámú technika alkalmazásával.

Hatékonyan valósították meg foszforvegyületek dimetil-acetiléndikarboxilátra történő foszfa-Michael addícióját és *2H*-pirán-2-on-származékok Kabachnik-Fields reakcióját katalizátor és a legtöbb esetben oldószer hozzáadása nélkül, mikrohullámú körülmények között.

A szubsztituált fenilecetsav és feniletilamin-származékok reakciójából nyert savamidok gyűrűzárásának lehetőségeit is vizsgálták mikrohullámú reaktorban.

Folytatták a TADDOL-alapú organokatalizátorok fejlesztését és tesztelését új modellreakciókban: CH-savas vegyületeként acetyl-acetont, dibenzoil-metánt és Meldrum-savat használtak, Michael akceptorként nitrosztírolt és szubsztituált származékait. A képződő adduktok hasznos gyógyszeripari intermedierek, a lemagasabb ee érték 85% volt.

Tanulmányozták az α - és γ -aminosavak enantiomerjeinek rezolválószerként történő alkalmazási lehetőségeit. Megállapították, hogy néhány esetben ezek a vegyületek „királis bázisként” jó enantiomer elválasztást eredményeznek. Megfigyelték, hogy a diasztereomerek keverékeinek elválasztásai során a kiindulási anyagok enantiomer-keverékeinek viselkedése meghatározza a diasztereomerek keverékeinek viselkedését is. A kidolgozott diasztereomer elválasztási módszerek környezetbarát eljárások, amelyek során oldószerként vizet alkalmaztak.

Egyszerű és hatékony eljárást dolgoztak ki az (*S*)-(+)-, és az (*R*)-(–)-2-(*N*-benzilamino)bután-1-ol nagytisztaságú (>99%) enantiomerjeinek előállítására a megfelelő benzilidénamino-származékok palládiumkatalizált hidrogénezésével. Ezeket a fontos és értékes ipari rezolválószerket a *cisz*-permetrinsav diasztereomersó-képzésen alapuló – szuperkritikus szén-dioxidban végrehajtott – rezolválásában alkalmazták sikerrel.

Új, királis négy- és öttagú heterociklusok enantioszelektív szintézisében védett amino- és hidroxioxetánok, valamint azetidinek redukzív katalitikus gyűrűnyitását, illetve azok *N*-debenzilezését és *O*-detritilezését oldották meg, majd az így kapott aminoalkoholokból és 1,4-diolokból gyűrűzárás után optikailag aktív pirrolidineket, illetve tetrahydrofuránokat állítottak elő.

A *transz*-dihidronarciclasin, egy jelentős citosztatikus hatással rendelkező fenantridon alkaloid, sztereoszelektív totálszintézise során ciklusos, telített nitrovegyületek jó hatásfokú hidrogénezését is megvalósították. Alternatív reakcióutat dolgoztak ki vanillinból kiindulva a fenti nitrovegyületek előállítására, amelyek így jobb hozammal kaphatók meg.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai 2012-ben is részt vettek tudományos diákköri munkát végző hallgatók témavezetésében, amely a tudományos kutatás iránt érdeklődő hallgatók nevelésének fontos eszköze.

A csoport vezetőjének irányításával előadás-sorozatot tartottak az élvezeti szerek és kábítószeres kémiaiájának, biológiai és társadalmi hatásainak ismertetésére. A szabadon választható tárgyat a BME karairól (építész, közgazdász, gépész, stb.) ismét közel 300 diák teljesítette. Az előadások célja, hogy a hallgatók az elsajátított korszerű ismeretek birtokában jobban felismerjék az ilyen szerek fogyasztásában rejlő veszélyeket és elkerüljék az életüket és környezetüket is negatívan befolyásoló addiktív szerek fogyasztását.

A csoport egyik fiatal kutatója részt vett a 2012. évi TDK-konferencia szervezésében és lebonyolításában, valamint a tudományt népszerűsítő két szakkollégiumi est szervezésében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A csoport tagjai szoros együttműködésben dolgoznak a befogadó tanszék oktatóival. A szekezet-meghatározásokhoz szükséges spektroszkópiai háttérrel a BME Szervetlen és Analitikai Tanszékével és az MTA TTK Szerkezetkémiai Osztállyal kialakított együttműködés biztosítja. A kvantumkémiai számításokat a BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével kooperációban végezték. 2012-ben a Richter Gedeon NyRt-vel kötött szerződéses kutatómunkákban vettek részt a csoport tagjai.

A tárgyévben a CNR-MTA kutatási együttműködés keretében egy magyar kutató rövid tanulmányútjára került sor a CNR firenzei intézetében és két olasz kutatónak 2, illetve 3 hetes budapesti tanulmányútja valósult meg.

A kutatócsoport vezetője a liszaboni székhelyű Hovione gyógyszergyár és a BME VBK közötti együttműködés magyar koordinátora. E munka keretében 2012-ben egy magyar hallgató többhónapos liszaboni tanulmányútjára került sor.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai 2012-ben 4 OTKA-pályázat teljesítésében vettek részt. Emellett sikeresen oldottak meg 3 ipari K+F szerződéshez kapcsolódó feladatot. A CNR firenzei intézetével (Dr. Alessandro Mordini) a fémorganikus területen fennálló CNR-MTA tudományos együttműködés keretében a III. pontban felsorolt tanulmányutak valósultak meg.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Faigl F, Mátravölgyi B, Deák Sz, Holczbauer T, Czugler M, Balázs L, Hermecz I: Useful, regioflexible methods for functionalization of 1-phenylpyrrole derivatives. *Tetrahedron* 68: 4259-4266 (2012)
2. Faigl F, Mátravölgyi B, Szöllősy Á, Czugler M, Tárkányi G, Vékey K, Kubinyi M: Synthesis of atropisomeric 1-phenylpyrrole derived amino alcohols: new chiral ligands. *Chirality* 24: 532-542 (2012)
3. Faigl F, Kovács E, Turczel G, Szöllősy Á, Balázs L, Holczbauer T, Czugler M, Mordini A: Novel stereoselective synthesis of 1,2,3-trisubstituted azetidines. *Tetrahedron: Asymmetry* 23: 1607-1614 (2012)
4. Grün A, Blastik Zs, Drahos L, Keglevich G: Microwave-assisted alkylation of diethyl ethoxycarbonyl-methylphosphonate under solventless conditions. *Heteroatom Chemistry* 23(3): 241-246 (2012)
5. Keglevich G, Grün A, Kovács R, Koós K, Szolnoki B, Garadnay S, Neu J, Drahos L, Greiner I: Heteroarylacetyl Chlorides and Mixed Anhydrides as Intermediates in the Synthesis of Heterocyclic Dronic Acids. *Lettes Drug Desing and Discovery*, 9(4): 345-351 (2012)
6. Pálovics E, Schindler J, Faigl F, Fogassy E: Behaviour of Structurally Similar Molecules in the Resolution Processes. *In Comprehensive Chirality (E.M. Carreira, H. Yamamoto eds), Vol. 8: Separations and Analysis (G.E. Traner vol. ed.)*, Elsevier, Amsterdam, 91-96 (2012)
7. Fogassy E, Pálovics E, Szelezky Zs: Reszolvási eljárás amfoter karakterű vegyületek körében. 120027 számú magyar találmányi bejelentés, 2012.

MTA–BME SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Tóth Bálint, az MTA doktora
1111 Budapest, Egry József u. 1.
telefon: (1) 463 1101; fax: (1) 463 1677
e-mail: balint@math.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A beszámolási időszak a kutatócsoport tevékenységének tizennegyedik éve, egyben a negyedik pályázati ciklus utolsó 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.

2012-ben a csoport kutatásainak súlypontja a fizikai és pénzügyi alkalmazások szempontjából érdekes sztochasztikus folyamatok vizsgálatán, valamint az információelmélet és matematikai statisztika problémáin volt. A beszámolóban – az elmúlt évek gyakorlatának megfelelően – kizárólag a kutatócsoport alkalmazottainak a témához közvetlenül kapcsolódó munkáiról adnak számot.

II. Az 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Fizikában és pénzügyi alkalmazásokban releváns sztochasztikus folyamatok vizsgálata

Fluktuációs becslést bizonyítottak az egydimenziós teljesen aszimmetrikus „tero range” folyamatban fellépő részecske-áramra abban az esetben, amikor az ugrási ráta függvény nem csökkenő, konkáv, exponenciálisan csökkenő meredekséggel. A karakterisztikus irányokban a fluktuációk a várakozásoknak megfelelően $t^{1/3}$ nagyságrendűnek adódtak. [1]

A kifejlesztett módszer alkalmazhatóságát biztosító feltételeket sikerült ellenőrizni a teljesen aszimmetrikus exponenciális „kőműves folyamat”-ra, ezzel megalkotva az első példát egy konvex hidrodinamikájú kölcsönható részecskerendszerre, ahol a karakterisztikákon keresztül az áram-fluktuáció $t^{1/3}$ nagyságrendű. [2]

Részletes leírást adtak a „rövidlátó” önelkerülő bolyongás, valamint az ezzel rokon öntaszító Brown-polimerekről a diffúzív határesetben magas (nem-rekurrens) dimenziókban. A megfigyelhető mennyiségek egy széles osztályára tudtak alsó és felső becsléseket adni, bizonyos esetekben pedig teljes centrális határeloszlás tételt bizonyítani. Ezzel a munkával több, korábban csak nem szigorú renormálási technikákkal vizsgált kérdésre adtak végleges választ. [5]

Determinisztikus fizikai rendszerek sztochasztikus viselkedése

Gravitációs térben mozgó két, különböző tömegű, egymással és a talajjal ütköző golyó által alkotott rendszer viselkedését vizsgálták abban a paramétertartományban, ahol a dinamika hiperbolikus. A diszkrét idejű dinamikára (logaritmikus korrekcióktól eltekintve) $1/n^2$ rendű korrelációlecsengést, illetve centrális határeloszlás tételt bizonyítottak a releváns külső paraméter (a tömegek aránya) lehetséges értékeinek egy nyílt halmazára. [3]

Ellenpéldát konstruáltak arra a biliárd-elméletbeli sejtésre, hogy a véges horizontú sarokpontmentes szóró biliárdokban a szingularitási struktúra komplexitása mindig szubexponenciális – vagyis hogy egy ütközési sorozat hosszával a lehetséges szimbolikus ütközési sorozatok száma nem nőhet exponenciálisan. Ennek az ellenpéldának messzemenő következményei vannak az ilyen rendszerek keverési tulajdonságainak vizsgálata során, mert új technikák kifejlesztését kényszeríti ki. [4]

Információelmélet és matematikai statisztika

Olyan véges, vagy megszámlálható állapotterű stacionárius és ergodikus folyamatok előre jelezhetőségét vizsgálták, ahol adott az állapottéren egy véges szórású megfigyelhető mennyiség. A lehetséges folyamatok egy elég széles osztályára – többek között minden „végesen Markov” folyamatra – megkonstruáltak megállási időknek egy olyan sorozatát, amikor a következő megfigyelés feltételes várható értéke – feltéve a folyamat eddig megfigyelt teljes múltját – pontonként konzisztens módon becsülhető. Végesen Markov folyamat esetén ezen megállási idők sorozata legfeljebb lineárisan, véges entrópiájú folyamatok esetén legfeljebb polinomiálisan nő. [6]

b) Tudomány és társadalom

2012-ben nem volt a csoportnak kifejezetten ilyen célú rendezvénye.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A csoport egy tagja 2012 áprilisától fél évig a müncheni Ludwig Maximilian Egyetemen volt vendégoktató, egy pedig 2012 szeptemberétől a Bristoli Egyetemen töltött 4 hónapot. A korábbi évek beszámolóiban említett szakmai együttműködések tovább élnek. A kutatócsoport tagjai rendszeresen részt vesznek a BME-n az oktatásban, beleértve TDK- és diploma témavezetést is. Új elem a nemzetközi kapcsolatokban a bécsi egyetemen újonnan megerősödött dinamikai rendszerek csoporttal való havi rendszerességű kapcsolattartás, váltakozó helyszínű közös szemináriumok formájában.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport egy tagja féléves professzori állást nyert el a müncheni LMU-n, pályázatot nyert el a Bonni Egyetem Hausdorff Matematikai Központjában. A lezáruló K71693 jelű OTKA-pályázat kiváltására beadott új, nyertes OTKA-pályázatban (K104745) a csoport két tagja is érintett, így továbbra is minden tag számára biztosított az utazás és vendégek hívásának a lehetősége.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Balázs M, Komjáthy J, Seppäläinen T: Microscopic concavity and fluctuation bounds in a class of deposition processes. *Annales de L'institut Henri Poincaré-Probabilités et Statistiques*, 48:(1) 151-187 (2012)
2. Balázs M, Komjáthy J, Seppäläinen T: Fluctuation bounds in the exponential bricklayers process. *Journal of Statistical Physics*, 147:(1) 35-62 (2012)
3. Bálint P, Borbély G, Némedy-Varga A: Statistical properties of the system of two falling balls. *Chaos*, 22: 026104 (2012)

4. Bálint P, Tóth IP: Example for Exponential Growth of Complexity in a Finite Horizon Multi-dimensional Dispersing Billiard. *Nonlinearity*, 25: 1275-1297 (2012)
5. Horváth I, Tóth B, Vető B: Diffusive limits for “true” (or myopic) self-avoiding random walks and self-repellent Brownian polymers in three and more dimensions. *Probability Theory and Related Fields*, 153: 691-726 (2012)
6. Morvai G, Weiss B: A note on prediction for discrete time series. *Kybernetika*, 48 (4): 809-823 (2012)

MTA–BME VÍZGAZDÁLKODÁSI KUTATÓCSOPORT

Józsa János az MTA doktora
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
telefon: (1) 463 1164; fax: (1) 463 1879
e-mail: jozsa@vit.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A kutatócsoport 2012-ben az öt évre megjelölt összes témakörrel foglalkozott: a *vízfolyásoknál* (a) folyami áramlások kaotikus jellege és örvénydinamikája, (b) folyók hidromorfológiája, (c) sűrű szuszpenzió áramlási viselkedése, (d) a fitoplankton dinamikája folyóvízben; *sekély tavaknál* (e) dinamikus kölcsönhatás jellegzőnk határfelületein, (f) fitoplankton ökológiai kutatás a Balatonon.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Folyami áramlások kaotikus jellege és örvénydinamikája témakörében a BME laboratóriumában, *folyami sarkantyús környezetet* modelláló kísérleti csatornában folytatták az áramlások PTV-alapú mérését és abból új kaotikus és fraktál-jellemzők Lagrange-féle numerikus eszközökkel való feltárását. A kifejlesztett módszerek olyan vizsgálatokat tesznek lehetővé, melyek térképszerűen tárják fel a jelen lévő – a turbulens diffúzióknál hatékonyabb, kaotikus elkeveredést okozó – szálas-fonalas struktúrákat. Megállapították, hogy a legerősebb keveredésű területek és a nagy tartózkodási idejű pontok egyaránt fraktálosak. A feladattal 1 kutató foglalkozott, két tanszéki és egy külső ELTE fizikus segítségével.

Fenti téma kutatásának megalapozásához a két sarkantyú között kialakuló áramlásokat *nyitott üreg körüli áramlásokkal* rokonították. A jelenségek megértéséhez az üreg szájánál kialakuló nyíróréteg instabil viselkedésének tanulmányozása vezet, különös tekintettel a visszacsatolási mechanizmusokra melyek a koherens viselkedés kialakulásáért felelősek. Arra jutottak, hogy a visszacsatolás mechanizmusában fontos szerepe van az üregben kialakuló örvények és a nyíróréteg interakciónak, amelynek elemzése egy megbízható örvénydetektáló algoritmus kidolgozását igényli. Az irodalomból ismert ún. klasszikus Q-kritériumon korrigálva, az újonnan kidolgozott detektáló kritérium több részletet fed fel az örvényekről a korábbiaknál. A feladattal 1 kutató foglalkozott, egy tanszéki és egy külső BME kutató segítségével.

Folyók hidromorfológiája témakörben részletesen foglalkoztak a kanyarfejltség-esés-vízhozam összefüggés vizsgálatával, és a Pannon-medence természetes folyóira igazolták, hogy a kanyarfejltségek változása ténylegesen összefügg az esés-változással, így jól használható az esés-viszonyok változásainak detektálására. Az első eredményekből azonban még csak burkológörbét lehet illeszteni a pontokra, ugyanis a változások leírásához – ahogy a csoport kutatási terve is célként kitűzi – további paramétereket is figyelembe kell majd venni. A kutatással 1 csoporttag foglalkozott, egy külső ELTE geofizikus segítségével.

A *folyami hidromorfológiai jelenségek numerikus modellezése* területén, a Trondheim-i Egyetemmel való együttműködésben olyan numerikus 3D áramlási és hordaléktranszport modellfejlesztést valósítottak meg, amely lehetővé teszi folyókban kialakuló helyi kimélyüléseknek a korábbiaknál pontosabb számítását. A modellt alkalmassá tették továbbá a vegyes szemösszetételű folyómedrekben lejátszódó morfodinamikai folyamatok (mederpáncélozódás és fölszakadása) számítására, amit teszteken igazoltak is. A munka részben a magyar-szlovák DuReFlood CBC finanszírozásában valósult meg. A kutatással 1 csoporttag foglalkozott, két Trondheim-i kutató és egy tanszéki TDK-hallgató bevonásával.

A sűrű szuszpenzió (pl. vörösiszap) terepi kiömlése témakörben az iszap viselkedésének jobb megértéséhez a szennyvíztisztítók utóülepítőjéből merítettek ismereteket. Numerikus modellezéssel és in situ mérések elemzésével feltárták, hogy mérsékelt áramlási sebesség mellett a híg és a zagyszerű szuszpenzió között karakteres határfelület fejlődik ki, és a sebességnyírás, továbbá a sűrűségkülönbségek összehatásaként a határfelület hullámos alakot ölt. Nagyobb sebességeknél a határfelület erodálódhat, és a sűrű zagy a folyadékba visszakeveredik. Mindezen helyenként kísérői lehetnek az iszapkiömlések folyamatának is; ezzel annak függőleges síkbeli kétrétegű mozgásként való leírására nyílhat esély. A kutatással a csoportvezető foglalkozott, egy külső ipari továbbá két külföldi kutató bevonásával, a víztudományok területén kiemelkedő impakt faktorú folyóiratcikket eredményezően.

A fitoplankton dinamikája folyóvízben témakörben publikálták a korábbi kutatások eredményeit. Erre alapozva, egy a beszámolási évben indított, Magyarország-Románia CBC Program finanszírozta EASATI projektben (melynek célja a Szamos hatásának vizsgálata a Tisza ökológiai állapotára), a *folyami algák szaporodásának új modelljét* dolgozták ki, beépítve azt egy a teljes Szamos-vízgyűjtőt leíró tápanyagforgalmi modellbe. A végső cél a tápanyagforgalmi és ökológiai modellezés eredményeiből javaslatok megfogalmazása a *Tisza vízgyűjtő-gazdálkodási tervének* továbbfejlesztéséhez. A munkában 2 csoporttag vett részt.

A sekély tavak témakörében a Fertő tavon kiépített mérőállásokon elindították a *Dinamikus kölcsönhatás jellegzőnák határfelületein* c. téma kutatását. Beüzemelték a Támop-pályázat keretében beszerzett korszerű örvény-kovariancia mérőállomásokat, számos további víz- és légkörfizikai érzékelővel együtt. A kölcsönhatás-folyamatok adatsorainak elemzésére speciális számítógépes algoritmusokat fejlesztettek. Az elemzésben és értékelésben legmesszebb a szél-áramlás-hullámzás területén jutottak. A munkát 1 kutató és a csoportvezető végezte, egy tanszéki kutató, továbbá a tanszéki és helyszíni műszaki segédszemélyzet közreműködésével.

A fitoplankton ökológiai kutatása keretében a Balaton Keszthelyi-medencéjében meglévő automatikus mérőállomást 2012-ben is üzemeltették, továbbra is a globális limnológiai mérőhálózat (GLEON) részeként. A folyamatos adatgyűjtés és a nagy időbeli felbontású mérési eredmények lehetővé teszik a tavak anyagcseréjének eddigieknél részletesebb vizsgálatát, valamint az egyes fizikai illetve ökológiai folyamatok szerepének pontosabb megértését. A kutatás 2012-ben az adatok elemzésének új statisztikai módszereire irányult, amely képes figyelembe venni a mérési eredményekben időközönként felbukkanó szisztematikus hibákat. A témára 1 kutató Bolyai János ösztöndíjat nyert. A munka saját és tanszéki forrásokból (mintegy 2 millió Ft értékben) valósult meg. A kutatócsoport 2 tagja foglalkozott ezzel a kutatással, külső terepi segédszemélyzet igénybevételével.

b) Tudomány és a társadalom

A kutatócsoport szakmai-tudományos közvélemény való bemutatkozását, 5 éves célkitűzéseinek és első eredményeinek bemutatását kiválóan szolgálta „A globálistól a lokálisig – új eredmények a vízgazdálkodás-tudományi kutatásokban” címmel, a 2012. évi Magyar Tudomány ünnepe főhetén, az MTA Műszaki Osztálya égisze alatt tartott tudományos előadóülés. Az ülésen a víztudományok és a vízgazdálkodási ágazat számos képviselője vett részt. A rendezvény alkalmat adott a szakmai kapcsolatok bővítésére, a csoport tudományos kutatásai társadalmi hasznosulásának előmozdítására. Utóbbit megerősíti az ülés kutatócsoporthoz eljutott visszhangja, és az előadások alapján különféle partnerségben formálódó projektek. A víz iránt a társadalmi érdeklődés továbbra is számottevő. Ennek kielégítésére 2012-ben a kutatócsoport tagjai, és tanszéki illetve külső támogatói több további ismeretterjesztő és vitaelőadást tartottak. Ezek közül kiemelendő a csoport tudományos főmunkatársának több, a Balatonnak a klímaváltozásban való érintettségét taglaló előadása.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A 2012. évi *folyami morfolodinamikai kutatásokban* fontos szerepet kapott a Norvég Műszaki és Tudományegyetem (NTNU) Vízépítési és Környezetmérnöki Tanszéke professzora és egy docense közreműködésével. Segítségükkel végezték el a numerikus modellfejlesztési feladatokat, és hozzájárultak a terepi mérések korszerű műszerekkel való végrehajtásához. Az együttműködés keretében tehetséggondozást célzó hallgatói mobilitás is megindult.

A kutatócsoport 2 taggal képviselteti magát a Global Lake Ecology Observatory Network (GLEON) világszervezetben, amely a tavak automatikus mérésével foglalkozó kutatók fóruma. Egyikük a szervezet végrehajtó bizottságában 3 éves mandátumot kapott. A csoport ugyancsak részt vesz a GLEON európai tagjaiból alakult NETLAKE projektben, amelyet az Európai Unió COST programja támogat. Magyarországot 2 tag, ill. 2 póttag (egyikük a Balatoni Integrációs Közhasznú Nonprofit Kft. vezetője) képviseli az irányító testületben. Tevékenységük főleg a modellezéssel és a tavak anyagcseréjének kutatásával foglalkozó 2. munkacsoportra terjed ki. A kutatócsoport vezetője tagja az International Association for Hydro-environmental Science and Engineering (IAHR) Fluid Mechanics Bizottságának, tagja az Országos Vízgazdálkodási Tanácsnak, és elnöke a Bolyai János Ösztöndíjbizottságnak.

A csoport *oktatási és kutatási kapcsolatai* 8 külföldi és 4 hazai egyetemre, továbbá két akadémiai kutatóközpontra és csoportra terjednek ki. A szakmai kapcsolatok túlnyomóan a projektek végrehajtásához kötődnek, és kiterjednek a vízgazdálkodás állami intézményeire is.

IV. 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport konzorciumi tagja az *Árterületek rehabilitációja a Duna Szap – Szob közötti közös szakaszán az árvízvédelem megerősítése és a folyó ökológiai értékeinek növelése érdekében (DuReFlood)* – Magyarország-Szlovákia CBC Program 2007–2013 keretében elnyert projektnek, amelyben kutatók és a vízügyi gyakorló mérnökök közös vizsgálatokkal elemzik az árvízlevezetés, a morfológiai és élőhely-viszonyok javításának lehetőségeit. A vizsgálat a Duna közös szakaszaira irányul, ahol a legkorszerűbb eszközökkel alapozzák meg a tanulmányt. A projekt 2012-re jutó költségkerete 15 millió Ft.

A kutatócsoport rész vesz abban a konzorciumban, amely 2012-ben nyerte el a Magyarország-Románia CBC Program által finanszírozott *EASATI („Ecological assessment of the Szamos-Somes River to determine its influence on the ecological state of the Tisza River”)* projektet. A konzorcium vezetői a Felső-Tisza-vidéki Környezetvédelmi, Természetvédelmi és Vízügyi Felügyelőség és az Agenția Națională pentru Protecția Mediului Satu Mare. A projekt célja a Szamos hatásának vizsgálata a Tisza ökológiai állapotára. A projekt 2012-re jutó költségkerete 9,5 millió Ft.

V. 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Homoródi K, Józsa J, Krámer T: On the 2D modelling aspects of wind-induced waves in shallow fetch-limited lakes. *Periodica Polytechnica - Civil Eng*, 56:(2) 127-141 (2012)
2. Istvánovics V, Honti M: Efficiency of nutrient management in controlling eutrophication of running waters in the Middle Danube Basin. *Hydrobiologia*, 686: 55-71 (2012)
3. Patziger M, Kainz H, Hunze M, Józsa J: Influence of Secondary Settling Tank Performance on Suspended Solids Mass Balance in Activated Sludge Systems. *Water Research*, 46:(7) 2415-2424 (2012)
4. Petrovszki J, Székely B, Timár G: A systematic overview of the coincidences of river sinuosity changes and tectonically active structures in the Pannonian Basin. *Global And Planetary Change*, 98–99: 109-121 (2012)

MTA–DE HOMOGEN KATALÍZIS ÉS REAKCIÓMECHANIZMUSOK 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 2012-ben

A kutatócsoport általános feladata a vizes közegű homogén katalitikus folyamatok és a vizes-szerves kétfázisú katalízis kutatása. Ez a kutatás magában foglalja új ligandumok és katalizátorok szintézisét és jellemzését, valamint egyes fontos katalitikus folyamatok részletes vizsgálatát. A beszámolási évben ezek közé több környezeti szempontból önmagában is kiemelkedő fontosságú terület is tartozott: a szén-dioxid hidrogénezése és formiátok katalitikus bontása; egyes halogénezett szénhidrogének katalitikus hidrodehalogénezése; valamint klórozott szénhidrogének és más környezetszennyező anyagok oxidációja. A számításhoz közeledő kémia egyre nagyobb mértékű alkalmazását indokolja, hogy lehetőséget ad a vizsgált folyamatok mechanizmusának jobb megismerésére olyan esetekben is, amikor kísérletes vizsgálatokra nincs lehetőség.

A mechanizmuskutatás területén részletes vizsgálatokat kezdeményeztek néhány élettani fontosságú szerves molekula oxidációs folyamatainak felderítésére. Elsőként a dopamin, mint a szervezetben is jelen lévő hormonhatású anyag, és triptofán, mint redoxikémia szempontjából kitüntetett fontosságú aminosav és ezek származékainak reakcióját tanulmányozták peroxomonoszulfát-ionnal vizes, semleges közegben.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Új vízoldható N-heterociklusos karbének (NHC) prekursorait állították elő imidazol-származékok és megfelelő szultonok reakcióiban. Előállítottak és részletesen jellemeztek több új Rh(I-), Ru(II-), és Ir(I)-foszfin-NHC vegyes ligandumú komplexet. Ezek közül több hatékonyan katalizálta enantiotiszta szekunder alkoholok racemizációját.

Megállapították, hogy a $[\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ komplex és különböző difoszfinok (pl. 1,3-bisz(difenilfoszfino)propán reakciójában *in situ* képződő komplexek igen hatékony katalizátorai sp^3 elektronkonfigurációjú szénatomokon végbemenő H/D cserének. Az eredményekről magyar szabadalmi bejelentést nyújtottak be.

Részletes ^1H NMR vizsgálatokkal megállapították a $[\{\text{RuCl}_2(\text{mtpms})_2\}_2] + \text{mtpms}$ rendszerben (mtpms = monoszulfonált trifenilfoszfin) különféle pH-jú vizes oldatokban, különféle H_2 nyomás alatt képződő Ru(II)-hidrid részecskék összetételét és szerkezetét. Az összesen öt részecske között terminális hidridek, egy dihidrogén komplex és egy dihidrido-dihidrogén Ru(II)-komplex található. A részecskeeloszlást sikerrel hozták összefüggésbe telítetlen aldehidek vizes-szerves kétfázisú hidrogénezésének a pH-tól és a H_2 -nyomástól való függésével. Az eredményeket egy jelentős presztízsű nemzetközi lapban közzétették.

Intenzíven folytatták a reverzibilis hidrogén tárolás/fejlesztés kérdéskörének vizsgálatát. Korábban már megállapították, hogy egyes vízoldható Ru(II)-foszfinokomplexek jó aktivitást mutatnak vizes oldatban a HCO_2^- katalitikus bontásában hidrogénre és hidrogénkarbonátra és hogy ez a reakció ciklusba kapcsolható a képződő HCO_3^- ugyanazzal a katalizátorral történő

visszahidrogénezésével. Az eredményeket 2012-ben az egyik legnagyobb presztízsű kémiai lapban (Angewandte Chemie International Edition) közölték. A beszámolási időszakban részletesen megvizsgálták a formiát bontás körülményeit, így pl. a különböző kationt tartalmazó formiát sók reakcióképességét, továbbá elméleti számításokat végeztek a reakció mechanizmusára vonatkozóan. Az eredményeket három nemzetközi konferencián ismertették.

A szalén ligandum közvetlen szulfonálásával majd azt követő hidrogénezéssel előállították a hidrolitikusan stabilis dihidro-szulfosalén (HSS) ligandumot, majd ennek segítségével a megfelelő Pd(HSS) és Ni(HSS) komplexeket. A Pd(HSS) komplex hidrogén atmoszférában nagy aktivitással katalizálja allil-alkoholok hidrogénezését és redox izomerizációját ketonokká vizes-szerves kétfázisú közegben. További olyan ligandumokat is előállítottak, melyben a szekunder amin csoportokat propán-, bután- és ciklohexán-híd köti össze. A Pd(HSS) komplex aktív katalizátornak bizonyult jó- és brómbenzol származékok különféle acetilénnel történő Sonogashira-kapcsolásában; a klórszármazékok a vártak megfelelően kisebb reaktivitást mutattak. Az eredmények közzétevése folyamatban van.

Spektrofotometriás technikával részletes kinetikai vizsgálatokat végeztek a dopamin és a norepinefrin peroxomonoszulfát-ionnal történő, vizes, semleges közegű oxidációjában. A részletes mechanizmusvizsgálat érdekében tanulmányozták a pH változtatásának hatását is. A reakciók első lépésére sikerült megállapítani a sebességi egyenletet, valamint ^1H NMR és tömegspektrometriás módszerekkel azonosították az első köztiterméket. A bruttó folyamat számos, egymást követő, ill. egymással párhuzamos lépésből áll, amelyek további tanulmányozása szükséges.

Spektrofotometriás és ^1H NMR technikával részletes kinetikai vizsgálatokat végeztek a triptofán és néhány szubsztituált származékának peroxomonoszulfát-ionnal történő, vizes, semleges közegű oxidációjában. A reakciók első lépése mindkét reaktánsra nézve elsőrendűnek bizonyult, az azt követő lépések viszont összetettebb sebességi egyenlettel írhatók le. A triptofánamid és a peroxomonoszulfát-ion közötti reakcióban egy rendkívül ritka kinetikai jelenségre derítettek fényt: spektrofotometriával mintegy húsz órán át követve a reakciót egyes hullámhosszokon négy szélsőértéket mutató görbéket sikerült detektálni, ami öt egymást követő folyamatra utal.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport kutatásainak túlnyomó része fontos társadalmi problémák (mint pl. a környezetszennyező szerves klórvegyületek lebontása) megoldási lehetőségeinek kereséséhez kapcsolódott. 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 2012-ben lezárult TÁMOP-4.2.2-08/1-2008-0012 (CHEMIKUT) valamint a TÁMOP-4.2.1B-09/1/KONV (kutatóegyetemi) pályázatok nyilvános rendezvényei (sajtótájékoztatók, záró rendezvények, helyi rádióban elhangzott interjúk) jó lehetőséget adtak a kutatócsoport munkájának szélesebb körű bemutatására is.

A kutatócsoport egyik munkatársa jelentős ismeretterjesztő és tudománynépszerűsítő tevékenységet folytatott: 2012-ben a Középiskolai Kémiai Lapokban, a Természet Világa és a Magyar Kémikusok Lapja folyóiratokban jelentetett meg ilyen jellegű közleményeket, illetve három középiskolában tartott kémianépszerűsítő előadásokat.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Nemzetközi együttműködésben végeztek kutatásokat a kétfázisú katalízis terén az Almeriai Egyetem (Spanyolország) kutatóival. Különösen jelentős volt az együttműködés a fotokémiai vizsgálatok terén.

A formiátok katalitikus bontása terén az EPFL (Lausanne, Svájc) kutatóival folytatnak együttműködést, elsősorban nagynyomású NMR mérések ottani elvégzése céljából. Ezek a mérések döntő fontosságúak a reverzibilis hidrogén tárolásra/fejlesztésre alkalmas kémiai rendszer kifejlesztésében.

A szerves kémiai reakciók mechanizmuskutatásának területén a kutatócsoport munkatársai együttműködést alakítottak ki Prof. Manuel Bassallote-val, a spanyolországi Cádizi Egyetem kutatójával.

A kutatócsoport munkatársai 2012-ben is részt vettek a Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszékének és Szerves és Analitikai Kémiai Tanszékének oktatómunkájában, laboratóriumi gyakorlatok és szemináriumok vezetésével (átlagosan 4 óra/fő/hét).

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A 2012. évben a kutatócsoport teljes alapkutatási témakörével részt vett egy sikeres NFÜ TÁMOP pályázatban (TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043, „Célzott kémiai és biológiai alapkutatások környezeti szennyezők felszámolására (ENVIKUT), 2013–2015”), melyet a DE Kémiai és Biológiai Intézetének hat kutatócsoportja és az MTA ATOMKI egy önálló laboratóriuma közösen nyújtott be. A pályázat szakmai vezetőjének feladatait a kutatócsoport vezetője látja el. A teljes támogatási összeg 899,6 M Ft, melyből az MTA–DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport mintegy 90 M Ft-ot használhat fel. A kutatócsoport több tagja résztvevője Fábrián István (DE) 2012-ben elnyert nagy összegű OTKA pályázatának kutatásaiban („Környezeti kémiai jelentőségű redoxireakciók: kinetika és mechanizmus”, 2013. jan. 1.–2016. dec. 31.; teljes támogatás 66,521 M Ft).

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Joó F: Hydrogenation of Alkenes, Alkynes, Arenes and Heteroarenes. Water in Organic Synthesis, Stuttgart: Georg Thieme Verlag, 95-119 (2012) (könyvfejezet)
2. Horváth H, Papp G, Laurenczy G, Joó F: Eljárás vegyületek C-H kötésének aktiválására és az azt szolgáló reakciórendszer. Magyar szabadalmi bejelentés. Lajstromszám: 1200411, ügyszám: P1200411/1, benyújtás száma: 1222836, benyújtás éve: 2012.

MTA–DE RÉSZECSEFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Trócsányi Zoltán, az MTA levelező tagja
4026 Debrecen, Bem tér 18/A.
telefon: (52) 509 201; fax: (52) 509 258
e-mail: zoltan.trocsanyi@mta.atomki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A kutatócsoport elméleti részecskefizika fenomenológia és kvantumtérelméleti kutatási feladatok megoldása céljából alakult. A fő célkitűzések a következők: (i) sugárzási korrekciók számítása hadronzapor hatáskeresztmetszetekhez; (ii) t-kvarkpárt és más részecskéket tartalmazó események szimulációja a Nagy Hadronütköztető ütközési energiáin; (iii) térelméleti modellek tanulmányozása a renormálási-csoport módszerrel; (iv) kvantumszindinamika tanulmányozása rács térelmélettel. 2012-ben az első három pontban érték el eredményeket. A negyedik pontot halasztották, ugyanakkor két új terület kutatásaiba kapcsolódtak be: (i) kinetikus elmélet és hidrodinamika elméleti vizsgálata különös tekintettel a nehézion-ütközésekben alkalmazásokra, és (ii) időfüggő mágneses térbe helyezett mágneses nanorészecskék relaxációs mechanizmusainak és energiafelvételének tanulmányozása.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Eseményeket generáltak $pp \rightarrow t \text{ anti-}t + H/Z/W$ folyamatokhoz az LHC ütközési energiákon (megjelent), valamint a $pp \rightarrow t \text{ anti-}t + b \text{ anti-}b$ folyamathoz (közléshez előkészítés alatt). Az eseményekkel hadronszintű fenomenológiai analíziseket végeztek. Folytatták a hadronzapor hatáskeresztmetszetek számításának elméletét: sikerült az összes regularizációs tagot integrálniuk (az utolsók közlésre beküldve), ami lehetővé teszi a hatáskeresztmetszet numerikus számítását (kidolgozás alatt).

A funkcionális renormálási csoport (RG) módszer alkalmas a nem-perturbatív renormálás végrehajtására. Azonban a közelített RG egyenletek függenek a regulátor-függvény, azaz a renormálási séma megválasztásától. Szükséges tehát a séma választás optimalizálása. Munkájuk során egy olyan regulátor függvényt adtak meg, amely egyrészt kompakt tartójú (véges intervallumon értelmezett) másrészt tetszőleges deriváltja létezik. Megmutatták, hogy megfelelő határértékekben visszaadja az összes eddig használt regulátort, azaz úgy tekinthető, mint egyfajta „prototípusa” a regulátor függvényeknek.

A funkcionális renormálási-csoport módszert alkalmazták különböző skalár-térelméleti modellekre. Megmutatták, hogy az $O(N)$ modell, a 2-dimenziós sine-gordon típusú modellek és a kvantum Einstein-gravitáció szimmetriasértett fázisaikban infravörös fixponton rendelkeznek. Azt találták, hogy e modellek fázisszerkezetei hasonlóságot mutatnak, továbbá az infravörös fixpont körüli skálázás megmutatja a fázisátmenet rendjét. Meghatározták a korrelációs hosszakhoz tartozó kritikus exponenseket az infravörös fixpontban, és megmutatták, hogy azok megegyeznek az átmeneti fixpont körül kapott exponensekkel.

Mágneses nanorészecskék relaxációja során energia felvétel történik az idő-függő külső térből és ez az energia átadódik a környezetnek, ami számos orvosi alkalmazással bír. Ilyen például bizonyos tumor sejtek elpusztítására használt lázterápia. Megvizsgálták az anizotrópia, relaxációra gyakorolt hatását, ami a forgó külső tér forgástengelyével egybeesett.

Megmutatták, hogy az anizotrópia figyelembe vételével nem lehet nagyobb energiavesztést elérni cirkulárisan polarizált tér esetén.

Megvizsgálták a relativisztikus hidrodinamikai egyenletek szokásos származtatását a kinetikus elméletből a relativisztikus Boltzmann-féle transzportegyenlet alapján. Megmutatták, hogy nem létezik egyértelmű eljárás a hidrodinamikai egyenletek lezárására. A Boltzmann-egyenletnek végtelen sok momentum térbeli integrálja van, amelyek a disszipatív áramok mozgásegyenleteként tekinthetők. Minden így nyert mozgásegyenlet azonos alakú, de a transzport-együtthatók minden esetben különböznek, ezért a relativisztikus disszipatív folyadék csupán 14 dinamikai változót tartalmazó egyenletrendszerrel írható le, amennyiben legfeljebb másodrendű Knudsen és/vagy inverz Reynolds számokra szorítkozunk.

Az eredmények alapkutatói jellegűek, az általános emberi műveltség gyarapítását szolgálják.

b) Tudomány és társadalom

Előadásokat tartottak a Nemzetközi Diákműhely Debrecenben megrendezett eseményén, a Magyar Fizikatanárok CERN-i továbbképzésén, valamint a Magyar Tudomány Napja ünnepségsorozaton az Akadémián a Higgs-részecske felfedezéséről beszéltek. Hasonló előadást rögzített a Veszprémi Városi Televízió. A filmet több városi televízió is közvetítette. A csoport három tagja szerzője volt egy *Fizikai Szemle* cikknek, amelyben a fénynél gyorsabb neutrínósebesség lehetséges következményeit tárgyalták középiskolások és tanáraik számára.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Rendszeresen szerveztek kutatói szemináriumokat mind Magyarországról, mind külföldről hívott előadókkal (l. <http://www.phys.unideb.hu/mta-deparg>). A csoport három tagja rendszeresen oktat a Debreceni Egyetem Fizikai Intézetében minden szinten (BSc, MSc, PhD).

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Eredményesen pályáztak a Meghívás 2012 pályázaton Ulrich Jentschura, a Missouri Tudományos és Technológiai Egyetem egyetemi tanárának vendégkutatói meghívásának támogatására (összesen 20 millió Ft + utazási támogatás értékben).

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Denicol G S, Molnar E, Niemi H, Rischke D H: Derivation of fluid dynamics from kinetic theory with the 14-moment approximation. *European Physical Journal A*, 48:(11) Paper 170 (2012)
2. Garzelli MV, Kardos A, Papadopoulos CG, Trócsányi Z: $t\bar{t} - W^\pm + t\bar{t} - Z$ hadroproduction at NLO accuracy in QCD with Parton Shower and Hadronization effects. *Journal of High Energy Physics*, 2012:(11) Paper 056 (2012)
3. Nagy S: Critical exponents of the O(N) model in the infrared limit from functional renormalization. *Physical Review D Particles Fields Gravitation and Cosmology*, 86:(8) Paper 085020. 7 p (2012) [2096860]
4. Nándori I, Rácz J: Magnetic particle hyperthermia: Power losses under circularly polarized field in anisotropic nanoparticles. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics*, 86:(6) Paper 061404. 8p (2012)

MTA–ELTE EGERVÁRY JENŐ KOMBINATORIKUS OPTIMALIZÁLÁSI KUTATÓCSOPORT

Frank András, az MTA doktora
ELTE TTK Operációkutatási Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C
telefon: (1) 372 2500/8132; fax: (1) 381 2158
e-mail: frank@cs.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A tágabb értelemben vett Egerváry Jenő Kutatócsoport (<http://www.cs.elte.hu/egres/>) egy közösség, amelynek három fő feladata van: A) strukturális és algoritmikus vizsgálatok a kombinatorikus optimalizálás területén, B) számítógépes implementációk, különös tekintettel az általuk kezdeményezett LEMON diszkrét optimalizálási és modellezési C++ programkönyvtárra (<http://lemon.cs.elte.hu/>), C) ipari partnerek megrendelésére végzett konkrét fejlesztések. A 3 fő irányzat egymással szoros együttműködésben dolgozik. A formális MTA-ELTE Egerváry Jenő Kutatócsoport főleg az (A) 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>), mely 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 2012-ben 21 új publikáció jelent meg. Sikerült a 2012-re vállalt kutatási célkitűzéseikben előrelépni a merevség, leemelések, összefüggőség-növelés, stabil folyamatok, paritásos feladatok, játékelméleti modellek, poliéderes leírások kombinatorikája, megkötött párosítási feladatok, és kódolt hálózatok területén. A csoport eredményei 2012-ben rangos konferenciákon szerepeltek: ISMP (Berlin), Matching, Matroids and Extensions (Waterloo), Discrete Geometry Workshop (Kyoto), NETCOD (Cambridge).

A csoport kiemelt feladatának tekinti a felsőoktatási képzésben való részvételt, tagjai 2012-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 2012-es évben több együttműködési projekt is folytatódott a kutatócsoport és ipari partnerek, konkrétan a Lufthansa, az IBM és a Nokia Siemens Networks részvételével. Az IBM egy kutatólabort is létesített az ELTE Operációkutatási Tanszékén. Az alkalmazott projektek megvalósításában a LEMON könyvtár jelenti a kiindulópontot.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Merevség: A csoport 6 tagja 7 dolgozatot írt ebben a témakörben. Tensegrity szerkezet alatt rudakból, huzalokból, rugókból álló szerkezetet értünk, mely be van ágyazva a térbe, és stabil a rugó és huzal erőivel szemben. Jellemezték a Hamilton-körben huzalozott stabil szerkezeteket, s ezzel megválaszoltak egy 1981-es és egy 2008-as nyitott kérdést. Minimális

k-merev gráfok élszámára adtak felső becslés magasabb dimenzióban. Erősen merev tensegrity szerkezeteket vizsgáltak egy brit társszerzővel, és kimutatták, hogy már 1 dimenzióban is NP-nehéz ennek eldöntése. Globálisan linkelt pontpárokat jellemeztek minimálisan merev gráfokban. Gain-matroidok és szimmetrikus beágyazások merevségét vizsgálták egy japán társszerzővel. A számegyenesen univerzálisan merev rúdszerkezeteket jellemeztek teljes páros gráf esetére. Szükséges és elegendő feltételt adtak egy síkbeli rúdszerkezet merevségére abban az esetben, ha annak két rögzített pontja egybeesik.

Játékelmélet: A csoport 6 tagja 4 dolgozatot írt folyamok és többtermékes folyamok stabilitásának vizsgálatáról. A vizsgált modellben több szereplő, például hálózati szolgáltatók, rendelkeznek egyazon csomópont-halmaz felett hálózatokkal, és céljuk közösen elvezetni a megadott igények kapcsolatait, s ezen belül egyéni költségeiket minimalizálni. A modell érdekessége, hogy ugyan egy a szereplők önző érdekeivel szemben stabil megoldás létezését bizonyították be, ezzel szemben a stabil megoldás megtalálására algoritmust adni nehéz, sőt, a probléma algoritmikusan ún. PPAD-nehéznek bizonyult. További cikkekben rokon modelleket, a stabil folyamok egyensúlyi tulajdonságait, a közösségi optimumot vizsgálták.

Matroid parity feladat: A lineáris matroid parity feladat súlyozott változatára adtak polinomiális algoritmust. Előrelépés történt a lineáris matroid parity feladat orákulumos modellben való megoldhatósága felé. A duálkritikus gráfok paritásos irányítását, illetve a 3-reguláris gráfok speciális esetét vizsgálták.

Poliéderes leírások kombinatorikája: A csoport 3 tagja dolgozott ebben a témában, 4 cikkben. Általánosított polimatroidokról bebizonyították, hogy kizárólag azok rendelkeznek a totálisan duális lamináris tulajdonsággal. A módszerrel felismerhetővé váltak a polimatroidokat leíró lineáris egyenlőtlenség-rendszerek.

Hálózati problémák: Hálózati kódolás (network coding) témájában 2 kutató 1 cikket írt, melyben a Gaussian relay hálózati modell vezetéknélküli változatában randomizált és determinisztikus algoritmussal keresnek megengedett kódolást. Másik 2 kutató 1 cikkében vizsgálta optikai hálózatban felmerülő kapacitáselhelyezési feladatot, mely kapcsolatban áll a Steiner részgráf feladattal, és melynek fix-parametrikus megoldhatóságát látták be.

b) Tudomány és társadalom

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 csoportvezető középiskolákban tartott kombinatorikus optimalizálást népszerűsítő előadásokat. A csoport egy tagja részt vesz a Kürschák József Matematikai Tanulóverseny szervezésében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-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.

A csoport a 2012-es évben vendégül látott 2 német, 2 holland, 1 vietnámi, 1 brit és 1 japán vendéget, és a csoport tagjai is elfogadtak vendégkutatói meghívásokat többek között japán, német, svájci, amerikai kutatóintézetektől. A csoport tagjai a 2012-es évben több alkalmazott projektben is részt vettek olyan vállalatokkal való együttműködésben, mint a Lufthansa, az IBM vagy a Nokia Siemens Networks.

A csoport tagjai az év során számos előadást tartottak jelentős nemzetközi konferenciákon: STOC (New York), ISMP (Berlin), Matching, Matroids and Extensions (Waterloo), Discrete Geometry Workshop (Kyoto), NETCOD (Cambridge), Discrete Geometry Workshop (Kyoto), illetve a csoport 3 tagja a 2012-es ISMP konferenciára meghívott szekciót szervezett, illetve a csoport 1 tagja egy hónapot töltött a Kiotói Egyetem vendégeként. További 2 kutató meghívott előadást tartott a Kiotói Egyetem diszkrét geometria workshopján.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Ebben az évben folytatódott a Japán–Magyar TÉT-pályázat, melynek keretében kibővül az együttműködés japán egyetemekkel.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Ebben az évben 21 dolgozat jelent meg a csoport Technical Report sorozatában, lásd http://bolyai.cs.elte.hu/egres/www/mf_techrep.html. Az alábbiakban a csoport tagjainak 2012-ben, referált folyóiratban megjelent cikkeit listázzák.

1. Bérczi K, Kobayashi Y: An Algorithm for $(n-3)$ -Connectivity Augmentation Problem: Jump System Approach. *Journal Of Combinatorial Theory Series B*, 102:(3) 565-587 (2012)
2. Jordán T: Highly connected molecular graphs are rigid in three dimensions. *Information Processing Letters*, 112:(8-9) 356-359 (2012)
3. Jackson B, Jordán T, Király C: Strongly rigid tensegrity graphs on the line. *Discrete Applied Mathematics*, (2012)
4. Király T, Lau LC, Singh M: Degree bounded matroids and submodular flows. *Combinatorica*, 1-18. (2012)
5. Bernáth A, Király T, Kovács E, Mádi-Nagy G, Pap G, Pap J, Szabó J, Végh L: Algorithms for multiplayer multicommodity flow problems. *Central European Journal of Operations Research*, 1-14 (2012)
6. Bernáth A, Király T: A unifying approach to splitting-off. *Combinatorica*, 32:(4) 373-401 (2012)
7. Frank A, Miklós Z: Simple push-relabel algorithms for matroids and submodular flows. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 29:(3) 419-439 (2012)
8. Farooq R, Fleiner T, Tamura A: Matching with partially ordered contracts. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 29: 401-417 (2012)

MTA–ELTE ELMÉLETI FIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Tél Tamás, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1. A
telefon: (1) 372 2546; fax: (1) 372 2509
e-mail: tel@general.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-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 új területek 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 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Részecskefizikai kutatások

Fenomenológia: Nagy visszhangot váltott ki a CERN 2012. júliusi bejelentése, hogy az LHC két nagy kísérlete, a CMS és az ATLAS megfigyelt egy új bozont, amelynek tulajdonságai lényegében megegyeznek a részecskefizikai Standard Modell régóta keresett Higgs skalárjának jellemzőivel. A 2012 végéig folytatódott kísérletek további analízise fogja eldönteni, hogy az új részecske elemi Higgs skalár-e vagy összetett állapot.

A csoport tagjai javasoltak egy effektív elméletet, amelyben a Higgs részecske új, erősen kölcsönható, nem királis fermionok kötött állapota. Meghatározták többek közt az új javasolt részecskék keltésének rátáját (hatáskeresztmetszetét) az LHC jelenlegi energiaszintjén. A modell meg tudja magyarázni a felfedezett új Higgs jelölt két fotonos végállapotában mért, a Standard Modell jóslatát meghaladó eseményszámot. A modellt és következményeit egy könyvfejezetben mutatták be.

A javasolt modellben az 1-hurok elektromágneses precíziós mennyiségek meghatározásához egy új, általános módszert dolgoztak ki 4-dimenziós impulzustérbeli levágás használatára, amely megőrzi az elmélet szimmetriáit. A módszert alkalmazták a gravitáció Einstein-Maxwell hatása által megadott effektív elméletében is, a mértékcsatolás gravitációs korrekciójának meghatározására, amelyre korábban ellentmondásos eredmények születtek.

Húrelmélet és kvantumtérelmélet: Kutatásaik egyik fő iránya a topológikus húrelmélet, mely a húrelmélet olyan matematikai modellje, ami a téridő geometriájának alaptulajdonságait vizsgálja. Jelentősége, hogy rálátást nyújt a húrelmélet alapkérdéseire és az elmélet fontos, szuperszimmetriát megőrző szektoraiban hatékony számolási módszereket biztosít. Jelenlegi kutatásaik a húrelmélet nem-perturbatív szerkezetét vizsgálják, instanton módszerek segítségével az ún. Donaldson-Thomas elméletekben.

Az AdS/CFT dualitás a nagy t'Hooft csatolású határesetben integrálható modellel írható le. Ezen integrálhatóság kihasználásával kétdimenziós számításokkal juthatunk egzakt eredményekhez a négydimenziós mértékelméletekben. A csoport egy tagja munkatársaival olyan függvényegyenleteket származtatott, melyeket determináns típusú operátorok anomális dimenzióinak kiszámolására lehetett használni.

A csoport másik tagja rácstérelméletek numerikus szimulációjával foglalkozott. Itt igen fontos, hogy lehetőleg minél jobban lecsökkentsük a diszkretizációs hibákat. Az $O(N)$ modellben sikerült olyan rácshatásokat találni, amelyekkel ezek a hibák lényegesen lecsökkenthetők. Az $N = 3,4$ és az $N \rightarrow \infty$ eseteket vizsgálták, az utóbbit analitikusan.

Másik kolléga az alacsony dimenziós kvantumtérelméletek nemperturbatív vizsgálatával, a véges méret effektusokkal, peremes kvantumtérelméletekkel és defektekkel, véges hőmérsékletű korrelációs függvényekkel foglalkozott. Munkatársával együttműködve hatékony numerikus módszert dolgozott ki peremes renormálási csoport folyamat követésére, ami az ún. gerjesztett állapotú g -függvényeken alapul. Ezekről korábban kimutatták, hogy a folyamat fizikáját teljesen jellemző mennyiségek, ún. moduli tér koordináták. PhD hallgatóival együttműködve kiterjesztette a korábban egy régebbi munkatársával együtt megalkotott véges térfogatú form faktor formalizmust nemdiagonális modellekre, és az elméleti jóslatokat a sine-Gordon modellben numerikusan is alátámasztotta.

Statisztikus fizikai kutatások

Fluktuációk és komplexitás: Liesegang-típusú kísérletekben meghatározták a helicoid struktúrák kialakulásának valószínűségét a rendszer tulajdonságainak (elektrolitek koncentrációja, hőmérséklet, stb.) függvényében. A helicoidokkal kapcsolatos szimmetria-sértést elméletileg megmagyarázták a kémiai reakciófrontok mögött végbemenő csapadék-képződési folyamatok tulajdonságain keresztül.

A csoport egy másik tagjának az év folyamán publikált munkájában a replikaszimmetria-sértő (RSB) spinüvegfázis robusztusságát sikerült kimutatnia: a térelméleti modell felső kritikus dimenziója alatt (azaz 6 dimenzió alatt) az ultrametrikus rendezettség jellemzi továbbra is az alacsony-hőmérsékletű fázist, bár számos új, az átlagtér-elmélettől különböző jellegzetességet találtak. Ezek közül a legfontosabb, hogy a rendparaméter-függvény töréspontja (x_1) nem tűnik el az átalakulási pontban, hanem egy dimenziótlan univerzális értéket vesz fel, amit vezető rendben ki is számoltak.

Extrém statisztikák: A galaxistérképek mélységi információinak kalibrálására az extrém fényességű galaxisokat használják. Az extrémek statisztikájának vizsgálatát azonban bonyolítja, hogy a megfigyelt mintákban a galaxisok száma véges és mintáról-mintára változik. A probléma megoldását a vonatkozó határeloszlások korrekcióinak meghatározása jelentette. Az eredmények lehetővé tették, hogy a galaxisok fényességére a Sloan Digital Sky Survey-ből kapott eredményeket értelmezni lehessen független, azonos eloszlású változók extrém eloszlásainak körében.

Egydimenziós fermion rendszerekben kialakuló frontokban meghatározták a részecskék sorrend-statisztikáját, s megmutatták, hogy az megegyezik a Gaussi unitér véletlen mátrixok extrém sajátértékeinek statisztikájával. Ez a kapcsolat váratlan, s remélhetően segíteni fog a fermion-rendszerek mélyebb megértésében.

Az időfüggően gerjesztett disszipatív rendszerek általános elméletében új eszközként jelenik meg az ún. snapshot attraktor. Ez egy, a távoli múltban indított pályasokaság elemeinek pillanatnyi helyzetét adja meg a fázistérben. Szellemében hasonló a meteorológiában használt ensemble előrejelzéshez. A koncepcionális modellek előnye, hogy bennük a meteorológiai 50-nel szemben gyakorlatilag akárhány elemből állhat a sokaság, és így pontos statisztikák nyerhetők. Egyetlen snapshot attraktoron kialakul egy egyértelmű eloszlás, mely természetesen időben változhat. Kimutatták, hogy klímamodellek által vizsgált változékonyság egy snapshot attraktor eloszlását tükrözi, s ezzel a klímának is új definícióját adták. Az extrémérték eloszlás minden esetben Weibull-eloszlásnak mutatkozik.

A kaotikus szórás területén a három vagy több szabadsági fokú rendszerek tulajdonságai máig nagyrészt felderítetlenek. Kimutatták, hogy egy tipikus, több szabadsági fokú kaotikus szórás problémában megfigyelhető kaotikus szerkezetek visszavezethetők a két szabadsági fokú rendszerekben megjelenő kaotikus szerkezetekre.

Klíma-motivált kutatások: Az atlanti-óceáni több évtizedes változékonyság (AMO) klímánk egyik fontos összetevője. Ez a változás az óceán felszíni hőmérsékletében figyelhető meg 20-30 éves periódussal, és messzemenő éghajlati kihatásai is vannak. A csoport tagjai egyszerű laboratóriumi kísérletsorozatot végeztek, mellyel kimutatták, hogy a jelenség lényege a forgás, a horizontális hőmérsékletkülönbség, és az időjárás rövid idejű változékonyságát szimuláló termikus zaj. A mért eredmények megfelelnek a numerikus szimulációk és az óceáni mérések adatainak is.

Az aljzat felszínének kis perturbációi által keltett belső hullámokat kísérletileg és numerikusan is tanulmányozták az alsó rétegben adott távolságra levő két akadály jelenlétében. Bizonyos, jól meghatározott távolságok esetén a belső hullámok amplitúdóját megnövelő rezonanciát találtak. A jelenséget a nemlineáris hullámok elmélete segítségével sikerült megmagyarázniuk.

Léggöri szennyező anyagok, mint pl. vulkáni hamu vagy radioaktív szemcsék sodródását szimulálták mért, valóságos szélmezőkben. Konkrét példaként az izlandi Eyjafjallajökull vulkán 2010-es kitörésekor és a 2011-es fokushimai reaktor balesetben kikerült aeroszol részecskék időbeli és térbeli eloszlását határozták meg. Ideális légrészecskékkel vizsgálták a kétrészecske távolságok időfüggésének statisztikai jellemzőit. Sikerült kimutatniuk az ún. Batchelor-skálázást, mely szerint a párok átlagos távolsága az idővel arányosan nő kb. 2-3 napon keresztül, azaz nem diffúzió jellegű, hanem annál sokkal gyorsabb.

b) Tudomány és társadalom

A csoport tagjai évek óta előadásokat tartanak az ELTE Fizikai Intézetének „Az atomoktól a csillagokig” című népszerűsítő sorozatában, és a klímakutatással kapcsolatban. A csoport vezetője a Fizika tanítása doktori programot is vezeti az ELTE Fizika Doktori Iskolájában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A csoport tagjai együttműködnek egy sor hazai kutatóhellyel (BME Fizika Tsz, MTA TTK MFA és MTA Wigner FK). Az ELTE-n folyó oktatásban is mindenki részt vesz különböző elméleti fizikai tantárgyak oktatásával. A csoport tagjai széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Ezek közül kiemelendők azok, ahová a kutatók hosszabb tanulmányutakat tettek, illetve ahonnan kutatók érkeztek látogatóba: a CERN Svájcban, a Drezdai Max Planck Intézet Németországban, a Paris-Sud Egyetem Franciaországban, az EWHA Egyetem Koreában, a London King's College Angliában, valamint a Miami Egyetem Floridában.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport három tagja és a csoport vezetője OTKA-pályázatok témavezetője, résztvevőként szerepelnek különböző OTKA-pályázatokban és az európai Húrelmeleti COST programban.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Takacs G, Watts GM: Excited state g-functions from the truncated conformal space. *Journal of High Energy Physics*, 2012:(2) Paper 082 (2012)
2. Taghizadeh-Popp M, Ozogany K, Racz Z, Regoes E, Szalay AS: Distribution of Maximal Luminosity of Galaxies in the Sloan Digital Sky Survey. *The Astrophysical J*, 759: 100 (2012)

MTA–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 2012-ben

Nagyműszeres kísérleti módszerekkel, és kvantumkémiai számításokkal jellemezték gyakorlati szempontból is érdekes fehérjék és peptidek (pl. veleszületett immunitás, cukorbetegség), valamint fehérje építőkövek szerkezetét, dinamikáját és kölcsönhatásait. Öt- és hattagú gyűrűs cukor-aminosavat állítottak elő, amelyeket β -peptidek építőelemeiként fognak hasznosítani.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Biopolimerek építőelemeinek szerkezete és kölcsönhatásai. A β -aminosavakból felépülő β -peptidek változatos másodlagos szerkezetet vehetnek fel, ami nagyban befolyásolható különböző konfigurációjú királis β -aminosavakkal. A kutatócsoport által felfedezett apoláris redő-szerkezet stabilitásának szisztematikus vizsgálatát végezték el kvantumkémiai módszerekkel. Heterokirálisan diszubsztituált β -aminosavakból felépülő modellek bizonyultak a leginkább redőképző hajlamúnak, de az eddigi feltételezésekkel szemben a homokirálisan diszubsztituált rendszerek is alkothatnak stabil redő-struktúrát. Az eredmények felhasználhatók redős másodlagos szerkezetű β -peptidek racionális tervezésekor [1]. 2-aminociklobután-1-karbonsavból felépülő 2-4 tagú β -oligopeptidek konformációját vizsgálták kvantumkémiai számításokkal és NMR módszerekkel. Az azonos vagy különböző abszolút és relatív konfigurációjú egységek kombinációjakor a monomerek lokális konformációs preferenciája megmaradt, így új foldamerek, jól definiált másodlagos szerkezetű oligomerek racionális tervezésére nyílik lehetőség a monomer egységek legó-szerű kombinációjával. A kiralitás-szabályozott foldamerek új csoportját állították elő és jellemezték, amik potenciálisan, biokompatibilis biopolimerként hasznosíthatók [cit.: Gorrea et al. J.Org.Chem. 77: 9795].

A n-diéderes szögek periodicitása a molekuláris rendszerekben inspirálta azt a leírasmódot, amely egy n-toroidális térben írja le a n-dimenziós Descartes teret. A Ramachandran térkép kettős torus reprezentációja a korrekten mutatja a gerinckonformációt leíró mindkét független változó és ezen keresztül a potenciális-energia felület folytonosságát. Ezt a transzformációt alkalmaztuk a fehérje feltekeredés alapjául szolgáló peptid építőelem leírására. A kettős torus leírasmódban a potenciális-energia felület minden pontjának értelmezhető a környezete, nincsenek élek amelyek megtörnék a felület valódi topológiára jellemző folytonosságot. [2].

Az Alzheimer kór kialakulása amiloid peptidek oligomerizációjához és polimerizációjához köthető. Az amiloid-szerű aggregátumokban talált fehérjedomének vizsgálata szekvenciafüggést gyakorlatilag nem mutatott ki, tehát az amiloid foldba való átalakulás hajtóereje a főlánc-konformációban várható. A kutatócsoportban kvantumkémiai módszerekkel (teljes geometria optimalizálás és vibrációs analízis különböző méretű parallel és antiparallel β -redőkön) vizsgálták az oligomerizáció termodinamikáját. Kimutatták, hogy az oligomerizáció mindkét esetben termodinamikailag kedvező folyamat, bár az antiparallel redők stabilabbak, és azt is, hogy a stabilitási és entrópiatagok jósolhatók - mivel a termodinamikai függvények relatív változása konstansnak mutatkozott. Megmagyarázták, hogy az antiparallel redők entrópiája a tagszám növelésével miért lépcsőzetesen változik [3].

ECD spektroszkópiával vizsgálták új, etil-diarilfoszfinát részletet tartalmazó[(S,S)-4 - (S,S)-7] és protonálható diarilfoszfinosav részletet tartalmazó[(S,S)-8 - (S,S)-11] királis koronaéterek

szerves protonált primer amin és aminosavészter vendégmolekulákkal alkotott komplexeit [cit: Székely et al J. Org. Chem. 18: 3396-3407].

Foldamer-komponensek szintézise. Az Exendin-4 variálható szakaszába foldamerek beépítését tűzték ki célul. Előállítottak egy 25db α - és 5db ciklikus β -aminosavból (aminociklopentánkarbonsav, ACPC) álló α/β kiméra peptidet. A szintézis során összehasonlították a manuális és mikrohullámú szintézis stratégiát. Elvégezték a peptid szerkezetvizsgálatát NMR- és ECD-spektroszkópiai módszerekkel. Öt- és hattagú gyűrűs cukor- β -aminosavak prekursorainak szintézisét valósították meg. Az ilyen típusú komponensek beépítésével várhatóan nő a módosított fehérje vízoldhatósága és javulnak farmakológiai tulajdonságai. A hattagú, piranózgyűrűs cukoraminosavak egyik választott modellje a 2-amino-2-dezoxi- β -D-glükopiranozil-karbonsav, melyben az amino- és a karboxilcsoport *transz*-állású. A glikozil-karboxamid előállítását a megfelelően védett glikozil-cianidon keresztül oldották meg. Esetenként anomer keverékek képződését tapasztalták. Az izomer 2-amino-2-dezoxi-D-mannopiranozil-karbonsav szintéziséhez, melyben az amino- és karboxil-csoport *cisz*-helyzetben van, új, gazdaságos módszer kidolgozását kezdték el. Az öttagú, furanózgyűrűs béta-aminokarbonsavak esetében előállították mindkét típust, azaz az amino- és a karboxil-csoportot *cisz*- ill. *transz* helyzetben tartalmazó modellvegyületek megfelelően védett származékait: a 3-amino-3-dezoxi-D-ribofuran-uronsav további kapcsolásokra alkalmas védett származékát, valamint a sztereoizomer 3-azido-3-dezoxi-D-xilofuran-uronsav származékot. A szerkezeteket IR- és NMR-spektroszkópiával támasztották alá.

A fehérjefunkció szerkezeti és dinamikai vonatkozásai. Az evolúció során szelekciós nyomás irányult a fehérjék aggregációs hajlamának csökkentésére. Ugyanakkor egyre inkább elfogadott, hogy új gének, fehérjék *de novo* keletkezhetnek korábban nem kódoló DNS-szakaszok átírása és lefordítása révén. A kutatócsoportban azt vizsgálták, hogy különböző GC-tartalmú, véletlenszerű DNS-szakaszok által kódolt hipotetikus fehérjék milyen rendezetlenségi, aggregációs és transzmembrán hélix-képző hajlammal rendelkeznek. Megmutatták, hogy ezek a tulajdonságok erősen függenek a kódoló DNS-szakasz GC-tartalmától, és a 40-50-60%-os GC-tartalmú régiók esetében az aggregációs hajlam az emberi fehérjékre jellemző tartományon belülré esik. A jelenleg ismert három, egyértelműen elfogadottan *de novo* létrejött, emberre jellemzően egyedi fehérje tulajdonságai összhangban vannak a megfigyelt tendenciákkal. Az aggregációs hajlam tehát nem akadályozza új fehérjék képződését [4].

A magányos töltött α -hélix egy újonnan azonosított fehérjeszerkezeti motívum. Korábban a kutatócsoport részvételével kidolgozott, két módszer konszenzusán alapuló predikciós eljárást felhasználva kimutatták, hogy ez a motívum meglehetősen ritka, az emberi fehérjék kb. 0,2 %-ában van jelen. Az érintett fehérjék ugyanakkor preferenciálisan RNS-molekulákhoz köthető biokémiai folyamatokban vesznek részt. Ennek ellenére a motívum nem tűnik hosszabb evolúciós időskálán konzerváltnak. A predikciós módszereket web-szerverbe is integrálták [cit: Gáspári et al. Biochem. Biophys. Acta 1824:637-646.].

A MASP-1 és MASP-2 a komplement aktiválódás lektin útjának korai enzimeit, ezáltal a veleszületett immunitásban töltönek be fontos szerepet. A kutatócsoport együttműködő partnerei *in vitro* evolúciós technikával kifejlesztettek a MASP-1 és MASP-2 enzimekre specifikus inhibitorpárt, amelyekkel funkcionális tesztekben bizonyították a MASP-1 elsődleges fontosságát a komplement aktiválódás lektin útján. Meghatározták mindkét enzim/inhibitor komplex kristályszerkezetét, amelyek feltárták az inhibitor-specifitás szerkezeti hátterét [5].

A Tc5b mindössze 20 aminosavból felépülő Trp-kalitka mini-fehérje. NMR módszerekkel történő vizsgálata során felderítették, és atomi szinten vizsgálták több lépésben történő feltekeredésének mechanizmusát. Dekonvolúciós eljárást dolgoztak ki a spektrumok kiértékelésére, és jellemezni tudták az egymással gyorsan cserélődő s ezért tiszta formáikban „láthatatlan” fel- és letekeredett, valamint közbülső állapotokat. Feltárták a fehérjegerinc

belső mozgékonyágának és a téralkat-átrendeződésnek molekuláris hátterét, valamint meghatározták a többlépéses feltekeredési folyamat termodinamikai paramétereit. A publikáció, amelyet 2012-ben fogadtak el, címlapra került a Chemistry folyóiratban.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport munkatársai 10 tudományt népszerűsítő előadást tartottak és 2 ismeretterjesztő cikket jelentettek meg.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Belföldi kapcsolatok: ELTE Biokémiai Tanszék (MASP, magányos töltött α -hélixek); ELTE Fiziológia és Neurobiológiai Tanszéke és MTA TTK Enzimológiai Intézet (MASP); Mezőgazdasági Biotechnológiai Kutatóközpont (magányos töltött α -hélixek); SZTE Kémiai Informatika Tanszéke (Ramachandran térkép); BME Szerves Kémia és Technológia valamint Szervetlen Kémiai és Analitikai Kémiai Tanszékei, MTA Alkaloid Kémiai Kutatócsoport és a Richter Gedeon gyógyszergyár (koronaéterek). Külföldi kapcsolatok: Torontói Egyetem (β -peptidek, Ramachandran térkép) és Universitat Autònoma de Barcelona Kémiai Tanszéke (β -peptidek), Aarhus-i Egyetem (Ramachandran térkép), San Luis-i Nemzeti Egyetem Kémiai, Biokémiai és Gyógyszerészeti Kara (aggregáció); EMBL-Hamburg (MASP). A kutatócsoport tagjai kötelező és speciális kollégiumok, valamint gyakorlatok tartásával részt vesznek az ELTE biológia és kémia BSc-, MSc-, és PhD-képzésben. A kutatócsoport vezetése alatt dolgozik 13 diákkörös és 5 PhD-hallgató, vezetésükkel 5 BSc- és 2 MSc-szakdolgozat készült.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Több 2012-ben indult OTKA-pályázatban vezetők (NK100769: szerkezeti-dinamika fehérje/peptid kölcsönhatásokban; PD101095: oligopeptidázok) vagy résztvevők (NK100769: komplement fehérjék) a kutatócsoport tagjai. Nemzetközi pályázataik: TÁMOP-4.2.1.B-09/1/KMR (EU és az Európai Szociális Alap) és az EU EAST-NMR (228461) pályázata.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Pohl G, Beke-Somfai T, Csizmadia IG, Perczel A: Exploiting diverse stereochemistry of β -amino acids: toward a rational design of sheet-forming β -peptide systems. *Amino Acids*, 43:735-749 (2012)
2. Jakli I, Jensen SJK, Csizmadia IG, Perczel A: Variation of conformational properties at a glance. True graphical visualization of the Ramachandran surface topology as a periodic potential energy surface. *Chem. Phys. Lett*, 547: 82-88 (2012)
3. Pohl G, Jakli I, Csizmadia IG, Papp D, Matias GF, Perczel A: The role of entropy in initializing the aggregation of peptides: a first principle study on oligopeptide oligomerization. *Phys. Chem. Chem. Phys*, 14: 1507-1516 (2012)
4. Ángyán AF, Perczel A, Gáspári Z: Estimating intrinsic structural preferences of de novo emerging random-sequence proteins: Is aggregation the main bottleneck? *FEBS Lett*, 586:2468-2472 (2012)
5. Rovó P, Stráner P, Láng A, Bartha I, Huszár K, Nyitray L, Perczel A: Structural Insights into the Trp-Cage Folding Intermediate Formation. *Chem. Eur. J.*, 19: 2628-2640 (2013)

MTA–ELTE GEOLÓGIAI, GEOFIZIKAI ÉS ŰRTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Haas János, a földtudomány doktora
1117 Budapest, Pázmány sétány 1/c
telefon: (1) 381 2127; fax (1) 381 2128
e-mail: haas@caesar.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A kutatócsoport a Pannon-medence és a környező régiók geológiai felépítésének és szerkezetének megismerése céljából regionális földtani, rétegtani, szedimentológiai és tektonikai kutatásokat végzett. Recens folyamatokkal potenciálisan összefüggő hőáram eloszlási kép feltárására kezdtek új, nagyfelbontású űrfelvételekre alapuló távérzékelési módszerfejlesztést. Földi plazmaszférában keringő műholdak VLF regisztrátumain geokockázati tényezők vizsgálatát folytatólagosan végezték.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az év folyamán a Springer Kiadónál megjelent a kutatócsoport vezetőjének szerkesztésében, munkatársainak közreműködésével a Magyarország földtanát angol nyelven összefoglaló „Geology of Hungary” c. kézikönyv új, korszerűsített, és bővített kiadása. A szintetizáló jellegű munka, amely a legutóbbi évtizedben végzett regionális geológiai kutatások eredményeit is tartalmazza, elsősorban a régió földtani felépítése iránt érdeklődő, továbbá különböző célú gyakorlati kutatásokban érdekelt nemzetközi szakközönség számára készült, de lényeges szerepe lehet a hazai szakemberképzésben is.

A dunántúli-középhegységi dolomitok kutatását célzó program keretében összefoglaló tanulmányok, publikációk készültek. Az eredmények sokoldalú paleoklimatológiai értelmezését összefoglaló cikk a *Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology* c. nemzetközi folyóiratban jelent meg. További két cikket nyújtottak be a *Sedimentology* c. nemzetközi folyóirathoz. Az eddig elért eredményekről beszámoltak a Magyarhoni Földtani Társulatban, az MTA Földtudományi Osztályának beszámoló ülésén, továbbá előadással és 4 poszterrel a Nemzetközi Szedimentológiai Asszociáció (IAS) ausztriai konferenciáján.

A Dunántúli-középhegység felső-jura deformációs jelenségeit vizsgálva kimutatták, hogy a deformáció extenziós feszültségmezőben történt. Összekapcsolható a tágabb területre jellemző szubdukcióval, de attól térben távol történt.

A Rudabányai-hegységben, valamint a Szlovák Karszt területén végzett szerkezeti és metamorf kőzettani kutatások valamint radiometrikus kormeghatározások alapján a Belső-Nyugati-Kárpátok mezozoos fejlődéstörténetét bemutató doktori dolgozat készült. A csoport több tagja részt vett a Szőlősárdói szerkezeti egység több fázisú, komplex deformációját vizsgáló munkában, melynek eredményeit hazai szakmai folyóiratban publikálták.

A környező területek geológiai kutatására vonatkozó hagyományos együttműködések folytatása mellett, új kutatásokat kezdtek az Atlasz-hegység területén Marokkóban, ahol a kiváló feltártsági viszonyok lehetővé teszik egyes mezozoos kőzetek részletes szedimentológiai vizsgálatát, továbbá a szerkezeti határok mentén megjelenő deformációs jelenségek megfigyelését. A terepi vizsgálatok során felismerték, hogy a medence peremén nem csak töréses, hanem képlékeny stílusú deformáció is végbement. A töréses deformáció során olyan kőzetek jöttek létre, amelyek emlékeztetnek az Aggtelek–Rudabányai-hegységben, a fő szerkezeti határok mentén létrejött kőzetekre.

OTKA kutatás keretében a Pannon-medence különböző területein (pl. Gerecse, Somogy, Zsámbéki-medence, Bükk-előtér) vizsgálták a középső-miocén végén és a késő-miocénben

kialakult szerkezeti elemeket, és a kapcsolódó üledékképződést. Megállapították, hogy Somogyban a késő-miocénben kialakult hátaik megváltoztatták a Pannon-tó lejtőüledékeinek előreépülési irányát. A kiemeltebb területek peremén levő vetőket ismertek fel a Gerecsében, ahol vetőmenti breccsák, partmenti kavicsok jelölik ki a szerkezetileg kontrollált medenceperemeket. A gerecsei és dél-bükki felszíni mérések, ill. szeizmikus szelvények alapján a deformáció extenziós vagy részben eltolódásos stílusban ment végbe. A deformáció a késő-miocén végén még folyt, amint arra rudabányai adatok utalnak. A törések mentén deformációs szalagokat azonosítottak a Déli-Bükk előterében, melyeknek a süllyedés-történettel való kapcsolatát tovább vizsgálják.

Az ELTE Geofizikai Tanszékének nyári hallgatói terepgyakorlatához kapcsolódva olyan késő-miocén szerkezeteket azonosítottak, melyek később, felújulva, és exhumálódva befolyásolták az Alpokalja egyes részeinek vízhálózatát és negyedidőszaki domborzatfejlődését. Komplex geofizikai módszerekkel sikerült a pre-tercier aljzatot az eddig ismertnél jobban leképezni.

A Radiometriai Laboratóriumban mintegy ötven minta urán-soros kormeghatározása történt meg. A minták főként a Budai-hegységből és a Gerecséből származtak, a vizsgálatok OTKA kutatási programok részét képezik. Szintén OTKA finanszírozásban megindult az Aggteleki-karszt barlangjaiban zajló klímakutatási program. Lezárták a Budai-hegység kiemelkedés-történetére vonatkozó kutatásokat, és erről összefoglaló cikket jelentettek meg.

2012-ben is részt vettek az ELTE Geofizikai Tanszékének két nyári terepgyakorlatán, ahol geoelektromos és szeizmikus terepi méréseket vezettek, valamint bekapcsolódtak a Tanszéken folyó neotektonikai kutatásokba.

A Wigner Kutatóközponttal közösen kifejlesztett müontomográfia több helyszínen méréseket végeztek, a kalibrációs mérések folytatása mellett megkezdték az alkalmazási próbákat is. Ezekről több publikációban számoltak be.

A 2012. január 25-én sikerrel pályára állított CHIBIS-M mikroműhold a geokockázati vizsgálatok keretében az ionizált felsőlégkört monitorozza. A műhold alacsony frekvenciás (ELF/VLF) e.m. hullámkísérletét a teljesen magyar (BLE-Space, ELTE) fejlesztésű SAS3-Chibis jelfeldolgozó egység biztosítja. A március elején megkezdett tudományos program sikerrel fut. A kutatócsoport részt vett az egy év alatt rögzített, az ELTE műholdvevő állomásán vett regisztrátumok elemzésében. A hullámalakok értelmezésében elért eredményeik a természetes keltésű villamos jelek plazmában terjedésének eddigi leírását több vonatkozásban is pontosították. A Pannon-medence recens folyamataival összefüggő hőáram-eloszlási kép feltárására új távérzékelési módszer fejlesztését kezdték meg. Ehhez saját vételű MODIS műholdas adatbázisuk 250 m felbontású úrfelvételeiből válogatták ki a részletes vizsgálatra alkalmas sorozatokat.

b) Tudomány és társadalom

A Fazekas Mihály Fővárosi Gyakorló Gimnázium matematika tagozatának évfordulós ünnepségén előadást tartottak a diákoknak a kéregdeformáció módjairól a világ több példáján keresztül. Müontomográfus méréseikbe bevonták a kőbányai Szent László Gimnázium diákjait. Egy csoportjuk a Kőbányai Pedagógiai Szolgáltató Központ természettudományos pályázatán I. helyezést ért el a kőbányai pincerendszer müontomográfiai vizsgálatáról készített filmjükkel, amely a kutatócsoport és a Wigner Kutatóközpont együttműködésében zajló kutatásokat örökítette meg.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A kutatás, az oktatás és a továbbképzés területén aktív együttműködés folyt a MOL Nyrt.-vel. Szoros volt a munkakapcsolat a Magyar Földtani és Geofizikai Intézettel, a regionális

geológiai kutatásokat, valamint paleomágneses és obszervatóriumi méréseket illetően, és az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont Földtani és Geokémiai Intézetével, az izotópgeokémiai vizsgálatok területén. A radiometriai labor rendszeres munkakapcsolatban állt az MTA Energiatudományi Kutatóközpont Izotópkutató Intézetével, valamint az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Részecske- és Magfizikai Intézetével. Konzorciális együttműködés keretében dolgoztak az MTA Csillagászati Kutatóközpont Geodéziai és Geofizikai Intézettel, elsősorban a hullámterjedési, ELF-VLF vizsgálatok, az űr-időjárás kutatásában.

A kutatócsoport meghatározó szerepet játszott a perm-triász határral kapcsolatos IGCP 572 projekt záró rendezvényének megszervezésében. Az Egerben megrendezett nemzetközi konferenciához 3 terepi bemutató is kapcsolódott. Részt vettek a Nemzetközi Szedimentológiai Asszociáció (IAS) Ausztriában rendezett konferenciájának szervezésében is. Együttműködés kezdődött marokkói kollégákkal, folytatódott az együttműködés osztrák, szerb, szlovák, olasz és lengyel partnerekkel geológiai és geofizikai kutatási témákban. A hullámterjedés és ELF-VLF vizsgálatok terén szoros együttműködésben voltak a következő kutatóhelyekkel: IKI, Izmiran (Oroszország); British Antarctic Survey, Cambridge (UK); Univ. of Otago, Dunedin (Új-Zéland); Univ. of Washington, Seattle (USA); Univ. of Natal, Durban (Dél-Afrika).

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Közreműködőként vesznek részt magyar-francia együttműködést támogató, a tárgyév folyamán elnyert TÉT-projektben (11-2-2012-0005), amelynek témafelelőse magyar részről a Magyar Földtani és Geofizikai Intézet, francia részről a CEREGE-CNRS Aix en Provence-i kutatólaboratóriuma. Az együttműködés célja egyes negyedidőszaki felszínformák (pl. folyóteraszok) és üledékek kormeghatározása, a felszínfejlődés elemzése. A téma címe: Duna menti teraszfelszínek datálása kozmogén izotópos és OSL mérésekkel: módszertani tapasztalatcsere és a mérések kalibrációja. Az egy éves 1. szakaszra a teljes támogatás 640.000 Ft

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szanyi Gy, Surányi G, Leél-Őssy Sz: Cave development and Quaternary uplift history in the Central Pannonian Basin derived from speleothem ages. *Quaternary Geochronology*, 14: 18-25 (2012)
2. Haas J, Budai T, Raucsik B: Climatic controls on sedimentary environments in the Triassic of the Transdanubian Range (Western Hungary). *Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology*, 353-355: 31-44 (2012)
3. Haas J, Hámor G, Jámor Á, Kovács S, Nagymarosy A, Szederkényi T: *Geology of Hungary* Berlin; Heidelberg: Springer Verlag, 2012. 236 p
4. Haas J: Geological and Tectonic setting. In: Lóczy D, Stankoviansky M, Kotarba A (szerk.). *Recent landform evolution: the Carpatho-Balkan-Dinaric Region*. Berlin; Heidelberg: Springer Verlag, 2012. 3-18
5. Wignall P B, Bond D P G, Haas J, Wie W, Haishui J, Xulong L, Altiner D, Védrine S, Hips K, Zajzon N, Sun Y, Newton R J: Capitanian (Middle Permian) mass extinction and recovery in western Thetys: A fossil, facies and $\delta^{13}\text{C}$ study from Hungary and Hydra Island (Greece). *Palaios* 27:(1-2) 78-89 (2012)

MTA–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 2012-ben

Biológiailag aktív peptidek, peptid-kimérák és peptid konjugátumok tervezése, szintézise, új szerkezet-funkció/hatás összefüggések törvényszerűségeinek feltárása, terápiás alkalmazás és diagnosztikumok kifejlesztése céljából. Szintetikus peptid-antigének, illetve gyógyszerhatóanyagok kutatása sokakat érintő betegségek (pl. tumor, TBC, autoimmun betegségek) korai diagnózisa és/vagy gyógyítása céljából. A kutatási tevékenységre három témakör jellemző:

Immunkémiai kutatások: A fenti betegségekhez kapcsolódó fehérjékből az ellenanyag válasz kiváltásáért felelős szakaszok (B-sejt epitópok), illetve a sejtes immunválasz létrejöttéért felelős régiók (T-sejt epitópok) azonosítása, a fehérjék antigénszerkezetének feltérképezése autoimmun betegségekben (pl. filaggrin, desmoglein), fertőzéssel szembeni (pl. *M. tuberculosis*), illetve tumorelles (pl. mucin glikoproteinek) immunválasz kiváltásában szerepet játszó fehérjékben. Az epitópfunkció megjelenéshez vezető szerkezeti/biókémiai tényezők tanulmányozása. Az epitóp peptidek kémiai szerkezetének módosításával mesterséges „szuperantigének” szintézise diagnosztika és/vagy szintetikus vakcina kifejlesztése céljából.

Kemoterápiai kutatások: Antimikrobiális vegyületek (pl. antituberkulotikumok, antivirális szerek) és *Leishmania* parazita fertőzés ellenes szerek, valamint daganatgátlók konjugátumainak előállítására célbajuttató peptidek felhasználásával. A célsejteken (tumorsejtek, fertőzött sejtek), illetve azokon belül előforduló struktúrák és ligandumok elemzése. Klinikai használatban levő (pl. vinkaalkaloidok, izoniazid), illetve új, részben általunk azonosított kemoterápiás vegyületek (pl. ferrocén származékok), enzim aktivátor/inhibitor peptidek és azok szelektivitását/sejtbejutását elősegítő célfelismerő struktúrákat (pl. hormon, CPP) tartalmazó biokonjugátumok tervezése, szintézise. A konjugátumok *in vitro* és *in vivo* hatásának és hatásmechanizmusának feltérképezése.

Neuropeptidek kutatása: Opiát-, illetve nociceptin receptoron ható természetes peptid ligandok (antagonisták, agonisták) és analógjaik előállítása az opioid peptidek evolúciós változékonyságának vizsgálata céljából, valamint heteromer receptor-komplexen ható bivalens peptid ligandok és származékaik szintézise és funkcionális jellemzése.

Részvétel a felsőoktatásban (BSc, MSc, PhD) előadóként, gyakorlatvezetőként és témavezetőként, a tehetséggondozásban (TDK-témavezetés), a természettudományos ismeretterjesztésben.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A vastagbél karcinómával kapcsolatos MUC2 glikoproteinen korábban lokalizált lineáris B-sejt epitóp „mag” régiójának szerkezeti módosításával tisztázták az egyes aminosavrészek szerepét az ellenanyag felismerésben. Megállapították, hogy a Thr¹⁹ Pro kivételével bármilyen aminosavra kicserélhető a kötődés csökkenése nélkül. A Gly²⁰ mérete miatt csak hasonlóan kisméretű aminosavakra cserélhető, de annak ellenére, hogy a Gly nem királis aminosav, kizárólag L-aminosav pótolhatja a szekvenciában. A Thr²¹ és a Gln²² szerepe a legfontosabb az epitópon belül, ezen aminosavak még hasonló méretű és karakterű aminosavakkal is csak a kötődés erősségének jelentős csökkenése árán helyettesíthetőek. Koronáriás szívbetegségben (CHD) és gyulladós bélbetegségben (IBD) szenvedő betegek szérumellenanyag specifikitását hasonlították össze egészséges kontroll személyekével, tühegyen előállított humán és

mikobakteriális hősokkfehérjék szekvenciáját lefedő dekapeptidek segítségével. A kötődésvizsgálatok alapján megállapították, hogy az epitóprégiók elhelyezkedése a fehérje felszínén szignifikáns különbséget mutatott a két betegség között.

Szintetizáltak hét új, a 4-es pozícióban rövid zsírsavval szubsztituált Lys(Ac) aminosavszármazékot tartalmazó GnRH-III hormon daunomicin konjugátumot. Összehasonlító *in vitro* vizsgálatokban megállapították, hogy a butánsavval acilezett származékok sejtbejutása és citosztatikus hatása mindkét vizsgált tumorsejtvonalon kiemelkedő volt. A kedvező receptorkötődési és lizoszomális enzimekkel szemben mutatott stabilitási adatok alapján *in vivo* kísérleteket terveznek tumoros egereken.

Előállítottak olyan új biokonjugátumokat, amelyekben egy 12-tagú hormon sajátosságú oligopeptidhez kétféle tumorellenes szer (metotrexát és daunomicin) kapcsolódik kovalens kötéssel. Mind a szintézis stratégia kidolgozása, mind pedig a multifunkciós konjugátum szélesebb, *in vitro* tapasztalt hatás-spektruma jelentős új tudományos felismerés.

In silico dokkolási módszerekkel, a dUTPáz kulcsenzimhez való kötődés alapján azonosítottak több új, potenciálisan *M. tuberculosis* baktérium ellenes hatású molekulát. Az *in vitro* kísérletekben hatékonyak bizonyult vegyületek (pl. TB5) származékait hordozó oligopeptiddel konjugálták. Megállapították, hogy *M. tuberculosis* baktériummal fertőzött makrofág kultúrában a konjugátum jelentős antituberkulotikus hatást mutat, ami összefüggésben volt azzal, hogy a megfelelően megválasztott peptid komponens jelenléte drámai mértékben megnövelte a TB5 sejtbejutásának mértékét.

b) Tudomány és társadalom

2012-ben a „Magyar tudomány napja” rendezvényhez kapcsolódóan két előadás hangzott el középiskolákban (Veres Pálné Gimnázium, Nagy László Általános Iskola és Gimnázium), és egy a Richter G. Vegyészeti Gyár Nyrt. „Kutatási Fórumán”. Az ELTE fordított TDK-rendezvényen három előadásra került sor. Cikk jelent meg a Természet Világa folyóiratban. A csoportból heten vettek részt külföldi (FP7, ANR, Israeli Science Foundation, UEFISCDI) és hazai (OTKA, MTA) kutatási pályázatok, valamint nemzetközi folyóiratba beküldött kéziratok bírálatában. A csoport magyar/angol nyelvű honlapja folyamatosan kiegészülve segíti a párbeszédet.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Közös publikációval, kutatási projekttel dokumentált hazai kapcsolatok: ELTE Szerves Kémiai Tanszék, Szervetlen Kémiai Tanszék, Fizikai Kémiai Tanszék, Immunológiai Tanszék, Számítógéptudományi Tanszék; Corvinus Egyetem Alkalmazott Kémiai Tanszék; SE Bőr-, Nemikórtani és Bőronkológiai Klinika, Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézet, III. sz. Belgyógyászati Klinika; Országos Onkológiai Intézet; Országos Korányi TBC és Pulmonológiai Intézet; MTA TTK Kémiai Kutatóközpont, MTA SZBK Biokémiai Intézet; ORFI; Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytani Tanszék; Soft Flow Hungary Kft; Richter G. Vegyészeti Gyár Rt.

Közös publikációval, kutatási projekttel dokumentált 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; Department of Inorganic and Organic Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, Prague, The Czech Republic; Institute of Biochemistry, CNR, Napoli, Italy.

Tudományos célú utazások: konferencia kiutazások, valamint a kétoldalú közös kutatások folytatását célzó rövid tanulmányutak (5 nap – 1 hónap). A kutatócsoport négy tagja, valamint négy PhD hallgató összesen 14 alkalommal utazott külföldre (Belgium, Olaszország, Franciaország, Németország, Nagy-Britannia, Spanyolország, Japán). Vendégkutatóként a

csoportban 7 látogatót (Department of Inorganic and Organic Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, Prague, The Czech Republic; Institute of Protein Research, CNR, Napoli, Italy; CNRS-Toulouse III, University, France) fogadtak 1-2 hét időtartamra. A csoport hét tagja mutatta be eredményeit nyolc nemzetközi konferencián: Polymers in Medicines, Prague, The Czech Republic; 1st COST Workshop, Università degli Studi di Milano, Milan, Italy; 12th Chinese International Peptide Symposium, Shenyang, China; 32nd European Peptide Symposium, Athens, Greece; EACR-22, Barcelona, Spain; 13th Naples Workshop on Bioactive Peptides, Napoli, Italy; 2nd Irish Peptide Workshop, University of Ulster, Coleraine, Ireland; 2nd International Conference on the “Perspectives of Cell Signaling and Molecular Medicine” Kolkata, India.

Oktatás: PhD témavezetés (8 fő), diploma-témavezetés (13 fő), tudományos diákköri (TDK) témavezetés (3 fő). Fő- és speciális kollégiumok, gyakorlatvezetés (biológia BSc, kémia BSc, környezettudomány BSc, vegyész MSc), PhD előadások, TDK/szakdolgozat/PhD dolgozat bírálata, vizsgáztatás. ERASMUS Oktatói/Hallgatói mobilitás.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport további (2012-2016) munkáját segíti az elnyert MTA projekt. Csatlakoztak egy új EU COST „Chemical approaches to targeting drug resistance in cancer stem cells” kutatáshoz (2012–2015) (MC tag). Egy új OTKA-program indult, amely a komplementrendszer aktiválódási mechanizmusával foglalkozik (közreműködő). A csoport részt vett az ELTE TÁMOP kutatóegyetemi program megvalósításában (peptidkémiai kutatások). Egy ANR-NKTH és két OTKA-program (témavezető) folytatódott (tumorellenes hatóanyagok célbajuttatása, *M. tuberculosis* ellenes szerek). További öt OTKA-programban (pl. neuropeptidek, reumatoid arthritis, LH-RH ligandok) folyt együttműködés (közreműködő). Folytatódott a két NKTH-TÉT (magyar–spanyol, magyar–dél-afrikai) és az MTA-CNR program (mindháromban témavezető).

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Dernovics M, Vass A, Németh A, Magyar A: Synthesis and application of a Sec2-containing oligopeptide for method evaluation purposes in selenium speciation. *Talanta*, 99: 186-193 (2012)
2. Füst G, Uray K, Bene L, Hudecz F, Karádi I, Prohászka Z: Comparison of epitope specificity of anti-heat shock protein 60/65 IgG type antibodies in the sera of healthy subjects, patients with coronary heart disease and inflammatory bowel disease. *Cell Stress And Chaperons*, 17:(2) 215-227 (2012)
3. Hegedüs R, Manea M, Orbán E, Szabó I, Kiss É, Sipos É, Halmos G, Mező G: Enhanced cellular uptake and *in vitro* antitumor activity of short-chain fatty acid acylated daunorubicin-GnRH-III bioconjugates. *European J. Medicinal Chemistry*, 56: 155-165 (2012)
4. Horváti K, Bacsá B, Szabó N, Dávid S, Mező G, Grolmusz V, Vértessy B, Hudecz F, Bősze Sz: Enhanced cellular uptake of a new, *in silico* identified antitubercular candidate by peptide conjugation. *Bioconjugate Chemistry*, 23:(5) 900-907 (2012)
5. Manea M, Tóvári J, Tejada M, Schulcz Á, Kapuvári B, Vincze, B, Mező G: *In vivo* antitumour effect of daunorubicin-GnRH-III derivative conjugates on colon carcinoma-bearing mice. *Anti-cancer Drugs*, 23:(1) 90-97 (2012)
6. Mihala N, Hudecz F: Amino acid and peptide bioconjugates. In.: *Amino Acids, Peptides and Proteins: Vol 37*, (Eds.: E. Farkas, M. Ryadnov), Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2012, pp. 1-39.
7. Uray K, Hudecz F: Effect of core epitope modification on the antibody recognition of a MUC2 mucin peptide. *Molecular Diversity*, 16: 103-112 (2012)

MTA–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 2012-ben

A 2012-es év az új ciklusra való felkészülés, az építkezés éve. Ennek jegyében két jelentős kísérleti projekt beindításában, ill. folytatásában vett részt a csoport. Ezen kívül a 2012. évi feladatok egyfelől a korábban megkezdett kutatások eredményeinek fontos nemzetközi folyóiratokban való publikálása, másrészt az esetenként hozzájuk társuló programcsomagok fejlesztése voltak. Aktív részt kívántak vállalni az ELTE Fizika szakoktatási tevékenységében, amelyet sikerrel teljesítettek.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az interneten megfigyelhető trendek alapján egyre nagyobb szerep jut a közösségi oldalaknak, illetve az olyan tudás-bázisoknak, amelyeket önkéntes hozzájárulás alapján független szerzők állítanak össze. A jelentős számú felhasználónak köszönhetően ezek a tudás-bázisok igen nagyméretűre gyarapodtak, a bennük lévő tartalom hatékony felhasználásához egy jól áttekinthető kereső vagy kategorizáló rendszerre lenne szükség. Az interneten azonban a tudásmennyiség olyan ütemben gyarapszik, ami lehetetlenné teszi az intézményesített kategorizálást. A New Journal of Physics 2012. májusi számában megjelent tanulmányukban megmutatták, hogy a címkéket összefogó hierarchia jelentősen befolyásolja a címkék együtt előfordulási statisztikáját. Érdekes megfigyelésük volt, hogy a címke-statisztikák a hierarchiát leíró irányított hálózat részgráf-mennyiségeitől (pl. a pontból induló irányított komponens mérete) jobban függtek, mint a teljes gráf mennyiségeitől (pl. a hierarchia csúcspontjától mért távolságtól).

Kísérleti biokémiában fontos cél a fehérje-funkciók megváltoztatása. A kutatócsoportban a fehérje-funkciókkal kapcsolatos kísérletek jobb tervezhetőségét támogató szoftver készült el az év során. A szoftver jelátviteli és fehérje-kölcsönhatási adatbázisokat foglal egységes keretbe, és egy online felületen (<http://PathwayLinker.org>) kényelmesen kezelhető formában tesz elérhetővé számos, független kísérleti adatot, illetve az adatok közti összefüggéseket is automatikusan kezeli. A PlosOne folyóiratban megjelent közlemény három példán keresztül mutatja be, hogyan lehet a szoftverrel előre jelezni egy tervezett kísérlet során a várható változásokat a sejt-funkciókban.

A kutatócsoport a részecskefizikához kapcsolódó három témakörben ért el eredményeket: az $U(N) \times U(N)$ szimmetriájú mezon modell fázisátalakulásának leírásában, a modell funkcionális renormálási csoport egyenleteinek csoport invariánsokon alapuló levezetésében és a önkölcsönható skalármodell fázisátalakulásának felösszegzett perturbációs számításbeli tárgyalásban. A három témakörben elért eredményeket az év folyamán három publikáció formájában közölték, kettőt a Physical Review D, egyet a Mod. Phys. Lett. A folyóiratban.

Az effektív potenciál számára 2010–11. folyamán kidolgozott eljárásban talált lokális minimumok véges hőmérsékletű viselkedését vizsgálták a három kvark-íz esetére a kvark-ízek számának inverze szerint haladó sorfejtés segítségével. A kétféle explicit

szimmetriasértés erősségei által kifizített síkban meghatározták azt a tartományt, amelyben az $U_v(2) \rightarrow U_v(3) \rightarrow U_L(3) \times U_R(3)$ lépésekben fluktuáció indukált elsőrendű fázisátalakulással történik a szimmetria helyreállása.

Mapping the ground states of the meson model with approximate $U(n) \times U(n)$ symmetry

Francia együttműködésben kidolgoztak egy nagy pontosságú, diszkrét Fourier-transzformáción alapuló numerikus algoritmust a skalár önkölcsönható térelmélet két-részecske irreducibilis formalizmusának két-hurokszintű közelítésében levezetett renormált önkonzisztens propagátor- és téregyenletek euklideszi térben való megoldására. Megállapították a véges hőmérsékletű fázisátalakulás másodrendű jellegét, meghatároztak különböző termodinamikai mennyiségeket és a statikus kritikus exponenseket.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoportban korábban született hálózati csoportkeresési eljárás felhasználásáról népszerűsítő publikációk készültek. Az idei évben a pszichológiai alkalmazásokban a személyiség-jegyek kapcsolati hálózatáról és magyar nyelvű szó-asszociációs hálózatról jelentek meg magyar nyelvű cikkek. Egy publikáció a Magyar Tudományban, további publikációk pedig konferencia-kiadványban jelentek meg.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A kutatócsoport szoros együttműködésben van több hazai és külföldi kutatóhellyel.

Hazai együttműködések: Különböző kutatócsoportokkal, az alábbi intézményekből: MTA KOKI, MTA Wigner FK RMI.

Nemzetközi együttműködések: Univ. of California. San Francisco: enzim reakció-dinamika
Peking University (PKU): biokémiai hálózatok.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA NN 103114 jelű pályázat „Komplex szabályozási hálózatok szerepe az egysejtű-többsejtű átalakulás során” címmel a molekuláris biológiai hálózatok vizsgálatát tűzi ki célul.
OTKA K 105447 jelű pályázat „Hierarchikus szerveződés komplex rendszerekben” címmel egy átfogó keretrendszer metodikai megalapozását tűzi ki célul.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tibély G, Pollner P, Vicsek T, Palla G: Ontologies and tag-statistics. *New J. Phys.*, 14: 053009 (2012)
2. Farkas I J, Szántó-Várnagy Á, Korcsmáros T: Linking proteins to signaling pathways for experiment design and evaluation. *PLoS ONE*, 7: e36202 (2012) <http://PathwayLinker.org>
3. Nepusz T, Vicsek T: Controlling edge dynamics in complex networks. *Nature Physics*, 8: 568-573 (2012)
4. Buzas A, Kelemen L, Mathesz A, Oroszi L, Vizsnyiczai G, Vicsek T, Ormos P: Light sailboats: Laser driven autonomous microrobots. *Appl. Phys. Lett.*, 101: 041111 (2012)
5. Vicsek T, Zafeiris A: Collective motion. *Physics Reports*, 517(3-4): 71-141 (2012)

MTA–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@uni-miskolc.hu; honlap: <http://www.matsci.uni-miskolc.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A pályázatban szereplő feladat:

Tömbi amorf anyagok (finanszírozó: MTA)

Átalakulási folyamatok szimulációja (finanszírozó: MTA)

A pályázaton kívüli munkák:

Mágneses keverés hatása a kristályosodó szerkezetre (finanszírozó: ESA)

Fém emulziók (finanszírozó: MTA)

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Tömbi amorf anyagok

A Cu-Zr-Ag ötvözetcsaládban megjelenő stabil olvadákszétválás határait meghatározták a mesterötvözetek vizsgálata alapján. A homogén olvadék hűtésekor egy Ag-ben gazdag olvadék válik ki. Három különböző tartományt különítettek el az Ag-ben gazdag olvadék mennyisége alapján. Nyolc összetételhez tartozó konódákat kiszámították a mérések alapján. A mesterötvözeteket ék formába öntötték és a gyors hűtésnek az olvadákszétválásra kifejtett hatását vizsgálták. A hűtési sebesség függvényében mérték a kivált cseppek méreteloszlását és összetételét.

A csoport új ötvözetcsalád vizsgálatába kezdett, amely a Ti-Ni, Cu ötvözetrendszer foglalta magába. Részletes irodalomkutatás után választották a Ti-Ni-Cu (+Hf, Zr, Sn, Be, Nb, stb.) ötvözeteket, melyek nagy szilárdságú amorf mintákat eredményezhetnek az irodalom szerint. A csoportban a Ti:Ni 60:40 at% arányú ötvözeteket kezdték vizsgálni. Mivel a Ni és a Cu korlátlanul oldják egymást, a Ni egy részét Cu-zel helyettesítve mesterötvözeteket készítettek ívolvasztással. A mesterötvözeteken fénymikroszkópos szövetszerkezet vizsgálatot, elektronmikroszkópos szövetszerkezet és fázisösszetétel vizsgálatokat, röntgen vizsgálatokat, illetve keménységmérést végeztek.

Amorf/kristályos szerkezetű $Ag_{8}Al_{8}Cu_{36}Zr_{48}$ ötvözetet állítottak elő öntéssel és őrléssel. Először legyártották a mesterdarabot, majd vizsgálták a kiinduló és az őrlés során kialakult szerkezeteket, az amorf hányadot és a termikus tulajdonságokat különböző technikákkal vizsgálták és a kétféleképpen előállított szerkezet tulajdonságait hasonlították össze. Továbbá előállítottak, majd őrltek különböző összetételű CuZrAl ötvözeteket. Cu-Hf-Al összetételű kristályos mesterötvözeteket őrléssel amorf/kristályos kompozitokká alakítottak maximum 30 órás őrléssel. Az elért tudományos eredményeket nemzetközi konferenciákon mutatták be, és nemzetközi folyóiratokban publikálták.

Átalakulási folyamatok szimulációja

Átalakulási folyamatok szimulációja sejt automata módszerrel

Rövidtávú diffúziós folyamatok egydimenziós sejtautomata szimulációi egy rendszerbe integrálva működnek. Melegalakítási kísérleteket végeztek, hogy a kapott mikroszerkezeti- és mechanikai tulajdonságokat megvizsgálva- és kiértékelve megalapozzák, a készülő melegalakítási sejtautomata szimuláció alapjait. A skálázáshoz hőkezelt, lágyított acél és

alumínium lemezek pólusábráit felvették, elkészítették a textúrasság matematikai leírását. Elkészítették a nitridálás, dekarbonizálódás, szferoidizálódás és csíráképződés folyamatának elvi szimulációját.

Hosszútávú diffúziós folyamatok modellezése, szimulációja ötvözetlen acélokban Sejt Automata és Véges Differencia módszerrel

Új módszert dolgoztak ki, amellyel szferoiditos szerkezetű acélok mikroszerkezetéről készült képeket lehet az ausztenitesedési szimulációkban felhasználni, pontosabbá téve így a modell szerkezeteket. Az új modell szerkezeteken szimulációkat végeztek, megvizsgálták, hogyan hat a hőmérséklet, illetve a szerkezeti paraméterek (ferrites mátrix szemcsemérete, cementitrögök átmérője, karbon koncentráció, csíráképződési helyek határ-szabadentalpiája) változása az ausztenit csíráképződésének kinetikájára. A szimulációk eredményeiből megállapították, hogy a csíráképződés sebessége a túlhevítéssel exponenciálisan növekszik, a ferrites mátrix szemcse fokozatszámával és a karbon koncentrációval egyenesen arányos, a cementit rögök átmérőjével pedig fordítottan négyzetesen arányos.

Az ESTPHAD módszer alkalmazása és fejlesztése

Az ESTPHAD módszer alkalmazásával az Al-Mn-Si rendszer alumíniumban gazdag sarkának feldolgozása történt meg. Két- és háromalkotós rendszerek likvidusz és szolidusz hőmérsékleteinek, illetve a megoszlási hányadosnak a számítását végezték el. A háromalkotós rendszerek megoszlási hányadosa számítási módszerének pontosítása volt az egyik legfontosabb feladat a 2012-es évre. Kidolgoztak egy új algoritmust, mellyel a diagramban a tiszta alkotótól távolabb eső összetételeknél is megfelelő pontossággal lehet a számításokat elvégezni.

Az elért tudományos eredményeket nemzetközi konferenciákon mutatták be, és nemzetközi folyóiratokban publikálták.

Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre (finanszírozó ESA)

A batch#2 úrkísérletekhez végeztek kristályosítási előkísérleteket állandó próba-mozgatási sebesség (0,1 mm/s), hőmérséklet gradiens (8 K/mm) és mágneses indukció (150 mT) mellett. A batch#1 úrkísérlet-sorozat próbáit (Al-7Si-1Fe ötvözet) megvizsgálták. A kapott lehülési görbékből a próbák hossza mentén 5 mm-enként egy saját készítésű szoftverrel kiszámították a szilárd/olvadék határfelület mozgási sebességét és a hőmérséklet gradienst. A próbák mikroszerkezetét EDS mikroszondával is vizsgálták. A kristályosítási és a mágneses tér paraméterek hatását elemezték a szekunder dendritág távolságok, változására, valamint az ötvöző elemek (Si, Fe) koncentrációjának eloszlására. Számos numerikus modellt készítettek, amelyekkel a forgó mágneses térrel (RMF) kevert fémolvadékok áramlástanai tulajdonságait (forgási profil alakja, forgási sebesség, fordulatszám) kívánták vizsgálni. A modellötvözet 75,5%Ga-24,5%In volt. A számítással kapott eredmények a kísérleti mérés eredményeivel összehasonlítva kellő egyezést mutattak.

A meglévő kristályosító berendezésük RMF-típusú magneto-hidrodinamikai keverőjét alkalmassá tették nagyobb intenzitású keverés létrehozására. A keverő induktora tekercselésének átalakításával, és egy új villamos tápegység beszerzésével, valamint üzembe helyezésével jelentős keverési intenzitásnövelést sikerült elérniük.

A próbában mért hőmérsékleti adatok számítógépen történő rögzítésére új adatgyűjtő hardvert helyeztek üzembe, és kifejlesztettek hozzá egy új szoftvert, amelynek segítségével kristályosítás közben egyszerűbben megoldható a hőmérsékleti adatok dokumentálása.

Fém emulziók

A mágneses keverővel ellátott kristályosító berendezés segítségével Al- 0,5 tömeg% Fe ötvözethez ólmot adagoltak. A minták szövetszerkezetét pásztázó elektronmikroszkóppal

vizsgálták. A nagyobb méretű ólom cseppek (100 μm), amelyek mozogtak az olvadékban, magukhoz gyűjtötték a kisebb méretű részecskéket és koaguláltak. A lehülés során az olvadékból a szétválás miatt először ~ 3 μm mérettartományú ólom tartalmú cseppek jelentek meg.

b) Tudomány és társadalom

A „Kutatók Éjszakája” rendezvénysorozat kiemelkedő lehetőséget biztosít a kutatócsoport számára, hogy bemutassa tevékenységét és közelebb hozza a hétköznapi embereket az elméleti kutatás szférájához. A Miskolci Egyetem fő szervezésében zajló rendezvényen az amorf vagy amorf/kristályos fémek általános bemutatása mellett az amorf anyagok készítését is kipróbálják az érdeklődők. Másik kitűnő lehetőség a kapcsolatteremtésre az egyetem nyílt napja, ahol a jórészt a középiskolásokkal és szüleikkel tudnak kommunikálni. A kutatócsoport tagjai a Miskolci Egyetemet segítve 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. Támogatták a Fazola Napok és a XIII. Fémkohász Szakmai Nap megrendezését is.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A kutatócsoport tagjai részt vesznek a Miskolci Egyetem teljes körű tevékenységében, az oktatás, a beiskolázás, a tudományos programok szervezése terén. A Kerpely Antal doktori iskolával szorosan együttműködve meghirdették az amorf fémek tudományterületet, amelyre várják a fokozatot szerezni kívánó hallgatók jelentkezését. A MICAST kutatási projektben együtt dolgoznak több egyetemmel és kutatóhellyel, úgymint az ACCESS eV, Aachen-Germany, a Cirimat, Toulouse-France, a SIMAP/EPM, Grenoble-France, az Institute of Materials Physics in Space, DLR-Germany, a Crystal Growth Laboratory, és az University of Victoria, BC-Canada. A BAY-NANO kutatóintézettel együttműködésben nagyfelbontású, átvilágításos elektronmikroszkóppal végeztek vizsgálatokat az amorfizált ötvözeteken.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Pályázatok: European Space Agency: 240.000 EURO (80.000 EURO/év) “Microstructure Formation in Casting of Technical Alloys under Diffusive and Magnetically Controlled Convective Conditions”

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Janovszky D, Tomolya K, Sycheva A, Kaptay G: Stable miscibility gap in liquid Cu–Zr–Ag ternary alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, 541: 353–358 (2012)
2. Janovszky D, Tomolya K, Sycheva A, Pekker P, Roósz A: Liquid separation in Cu–Zr–Ag ternary alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, Article in Press (2012)
3. Tomolya K, Janovszky D, Janvari T, Sycheva A, Tranta F, Solyom J, Ferenczi T, Roosz A: Consolidation of Cu₅₈Zr₄₂ amorphous/nanocrystalline powders by PM. *Journal of Alloys and Compounds*, 536S: S154– S158 (2012)
4. Tomolya K, Janovszky D, Sycheva A, Benke M, Erdohegyi Cs, Roosz A: Investigation of AgAlCuZr amorphous/crystalline structure produced by casting and milling. *Journal of Alloys and Compounds*, Article in Press (2012)

MTA–MTM–ELTE PALEONTOLOGIAI KUTATÓCSOPORT

Pálfy József, az MTA doktora
1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/C
telefon: (1) 381 2129; fax: (1) 381 2130
e-mail: palfy@nhmus.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

A kutatócsoport az idén indult ötéves ciklus során is a bioszféra múltbeli fejlődéstörténetének megismeréséhez járul hozzá nemzetközi hatású őslénytani kutatómunkával és publikációs tevékenységgel. A kutatások három fókuszterület köré szerveződnek:

1. Az őslénytani leletanyag segítségével a bioszféra kiemelkedő jelentőségű eseményeit vizsgálják (tömeges kihalási események, adaptív radiációs időszakok, fauna- és flóraváltások), értelmezve ezek kapcsolatát az egyidejű, globális és regionális ösföldrajzi és környezetváltozásokkal, elsősorban az éghajlatváltozással.
2. Kutatják hazánk kiemelkedő, hungarikumnak számító ősmaradvány-lelőhelyeit, ezek leletanyagát korszerű tudományos módszerekkel feldolgozva.
3. A fenti célok támogatására taxonómiai és biosztratigráfiai feldolgozó munkát végeznek, a vizsgált ősmaradványcsoportok körében monografikus leíró munkát, paleobiológiai és filogenetikai kutatásokat folytatnak.

A beszámolási év legfontosabb kutatási feladatai voltak:

- A középső triász adaptív radiáció vizsgálata;
- A triász végi és kora jura kihalási események oknyomozása;
- A Pannon-tó késő miocén endemikus puhatestű faunája, öskörnyezeti és ösföldrajzi fejlődéstörténete;
- Pleisztocén gerinces faunák kutatása;
- Késő pleisztocén és holocén éghajlatváltozások nyomozása a Kárpát-medencében, hegyvidéki és síkvidéki tavi üledékek vizsgálata alapján.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A Balaton-felvidék, a Déli Alpok és Nevada területéről publikált ammonoidea faunisztikai adatokból szubzóna-szintű adatbázist hoztak létre. A diverzitási adatok alapján a középső-triászban két ammonoidea virágkort igazoltak, egy globális jelentőségűt a pelsoi alkorszakban és egy regionális, a nyugati Tethys-re korlátozódót az illyr alkorszakban.

A Vardar-zónából ismert, ofiolitokhoz kapcsolódó radiolaritok biosztratigráfiai vizsgálatával tovább pontosították a Neo-Tethys nyugati ágának felnyílási korát és a hozzá kapcsolódó bazalt vulkanizmus kezdetének dátumát a középső triászban.

Jelentős mennyiségű adattal gyarapították a Paleobiology Database elnevezésű globális nyílt őslénytani adatbázist, és hazánkban először végeztek adatelemzést ennek felhasználásával. Igazolták, hogy a triász-jura határon a radiolariák körében is jelentős kihalás történt, amely nem következik közvetlenül az óceáni savasodás mindinkább elfogadott elméletéből.

Őslénytani, szeizmikus, és mélyfűrési kutatási adatok szintézisével továbbfejlesztették a Pannon-medence késő neogén kori feltöltődési modelljét. Kimutatták, hogy a medencelejtő

épülését aggradáló és progradáló szakaszok jellemzik, a mélyvízi homoktestek (a potenciális szénhidrogén-tárolók) az előbbiekhöz kapcsolódva alakulnak ki. Térképsorozaton rekonstruálták a Pannon-medence feltöltődését a késő miocén és kora pliocén folyamán. A földtani modell a szénhidrogénkutatás eredményességét növelheti. A puhatestűek rendszertani és paleoökológiai vizsgálata a nemzeti természeti örökségnek tekinthető endemikus pannontavi fauna jobb megismerését mozdítja elő.

Elkészítették a Süttői Travertino Komplexumból ismert összes gerinces- és csigafauna, valamint flóra paleoökológiai és rétegtani elemzését.

Összeállították és megjelentették a Magyarországról, illetve magyar szerzők által leírt fosszilis pocokféléket áttekintő, „A magyar Arvicolinae típusok katalógusa” c. munkát.

Diatomavázak oxigénizotóparány-változásait felhasználva bizonyították, hogy a Kárpát-medence keleti területeinek holocén téli csapadékeloszlása az Észak-Atlanti Oszcilláció változásainak megfelelően nagy amplitúdójú és kb. 2000 éves ciklicitású fluktuációt mutatott.

Rekonstruálták az erdőtüzek intenzitásának mértékét a Kárpát-medencében az elmúlt 15 000 évben, és megállapították, hogy a medence kora holocén erdőségeit kb. 80–100 éves gyakoriságú erőteljes erdőtüzek jellemezték feltehetően a nyári besugárzás növekvő mértékével összefüggésben egészen 6500 évig.

Kvantitatív klímarekonstrukciót végeztek a késő glaciális időszakokra pollen és fosszilis árvaszűnyog közösségeket felhasználva és ezek eredményeit modellszimulációkkal vetették össze. Megállapították, hogy a Kárpát-medence keleti területeit lehűlések esetén kisebb nyári középhőmérséklet csökkenés, ugyanakkor erős szárazodás és a szezonális eltolódása jellemzi.

b) Tudomány és társadalom

Televíziós interjúban ismertették, hogy a tavi üledékeken végzett öskörnyezeti vizsgálatok hogyan járulnak hozzá a táj múltjának és jelenének, a klímaváltozások ökoszisztémákra gyakorolt hatásának megismeréséhez.

Az ELTE-n és a Nyugat-Magyarországi Egyetemen órarenden kívüli előadásokban is segítettek a hallgatókat a klímaváltozás mechanizmusának megértésében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet játszanak a hazai őslénytani tudományos közéletben, mint a Magyarhoni Földtani Társulat Őslénytani-Rétegtani Szakosztályának vezetőségi tagjai. A kutatócsoport egyik tagja tölti be az MTA Földtudományok Osztályának elnöki tisztét. A kutatócsoport vezetője az MTA Földtudományi Doktori Bizottsága elnöke. Többen hazai és nemzetközi tudományos folyóirat szerkesztőbizottságában is tevékenykednek.

Az ELTE-n folyó oktatásban a kutatócsoport vezetőjén kívül több tag is vesz részt BSc-, MSc- és PhD-kurzusok tartásával, TDK-, BSc-, MSc- és PhD-témavezetéssel.

A kutatómunka során aktív nemzetközi együttműködés folyt amerikai, kanadai, angol, francia, spanyol, német, romániai, és lengyel kutatókkal.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az MTA könyv- és folyóirat-kiadási pályázatán elnyert 762 E Ft támogatás tette lehetővé „A magyar Arvicolinae típusok katalógusa” kiadását.

Sikeres új OTKA-pályázat (K 104506, 4 évre 10.293 E Ft támogatással) témája „Magyarország legjelentősebb középső-pleisztocén szárazföldi lelőhelyének (Somssich-hegy 2, Villány) taxonómiai, tafonómiai, paleoökológiai és rétegtani vizsgálata”.

Egy kutató Humboldt Ösztöndíjat nyert el a Kölni Egyetemen folytatandó kutatómunkára, 70.000 Euro támogatással, a „Kárpátok ökoszisztémáinak válasza az utolsó eljegesedés gyors klímaváltozásaira” témájában.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Geary DH, Hoffmann E, Magyar I, Freiheit J, Padilla D: Body size, longevity, and growth rate in Lake Pannon melanopsid gastropods and their predecessors. *Paleobiology*, 38: (4) 554-568 (2012)
2. Magyari E, Jakab G, Bálint M, Kern Z, Buczkó K, Braun M: Rapid vegetation response to lateglacial and early Holocene climatic fluctuation in the South Carpathian Mountains (Romania). *Quaternary Sci Rev*, 35: 116-130 (2012)
3. Buczkó K, Magyari EK, Hübener T, Braun M, Bálint M, Tóth M, Lotter AF: Responses of diatoms to the Younger Dryas climatic reversal in a South Carpathian mountain lake (Romania). *J Paleolimnol*, 48: (2) 417-431 (2012)
4. Tóth M, Magyari EK, Brooks SJ, Braun M, Buczkó K, Bálint M, Heiri O: A chironomid-based reconstruction of late glacial summer temperatures in the southern Carpathians (Romania). *Quaternary Res*, 77: (1) 122-131 (2012)
5. Ozsvárt P, Kovács S: Revised Middle and Late Triassic radiolarian ages for ophiolite mélanges: implications for the geodynamic evolution of the northern part of the early Mesozoic Neotethyan subbasins. *B Soc Geol Fr*, 183: (4) 273-286 (2012)
6. Pálffy J, Zajzon N: Environmental changes across the Triassic–Jurassic boundary and coeval volcanism inferred from elemental geochemistry and mineralogy in the Kendlbachgraben section (Northern Calcareous Alps, Austria). *Earth Planet Sc Lett* 335-336: 121-134 (2012)
7. Szentesi Z, Venczel M: A new discoglossid frog from the Upper Cretaceous (Santonian) of Hungary. *Cretaceous Res*, 34: 327-333 (2012)
8. Vörös A: Episodic sedimentation on a peri-Tethyan ridge through the Middle-Late Jurassic transition (Villany Mountains, southern Hungary). *Facies*, 58: (3) 415-443 (2012)

MTA–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 2012-ben:

A légköri aeroszol részecskék optikai tulajdonságainak, képződésének, növekedésének és összetételének vizsgálata; az új részecskék elektronmikroszkópos vizsgálata; az aeroszol-képződés környezeti feltételeinek tanulmányozása, adatszolgáltatás nemzetközi adatbázisba a légköri aeroszol méreteloszlásáról, optikai és kémiai jellemzőiről; szeszkviterpén emissziós fluxusának becslése gombatenyészetekből; légköri nyomgázok ülepedésének vizsgálata

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport tagjai két mérési kampány során tanulmányozták a háttérlevegőben végbemenő aeroszol-keletkezés folyamatát. A mintavételekre 2012 tavaszán és nyarán került sor, amikor a részecskéképződési folyamatok a legintenzívebbek és a leggyakoribbak. A keletkező részecskék számkoncentrációjának és méret szerinti eloszlásának mérése mellett, a részecske-keletkezési epizódok idején aeroszol mintákat gyűjtöttek, és vizsgálták a 30 nm illetve 60 nm alatti aerodinamikai átmérővel rendelkező frissen keletkezett részecskék kémiai összetételét, az egyedi részecskék méretét és morfológiáját. Az aeroszol extraktumának kémiai összetételét tömegspektrométerrel tanulmányozták közvetlen mintabevittel, illetve gázkromatográfiás elválasztást követően. Az új részecskék méretét és morfológiáját transzmissziós elektronmikroszkóppal vizsgálták. Megállapították, hogy a 30 nm alatti részecskék zömét 20-50 nm-es korom részecskék adják, melyek főként aggregátumok formájában kapcsolódnak össze. A korom mellett nagy számban fordultak elő amorf szerkezetű kátránygömbök és szulfát tartalmú szerves részecskék is. Megfigyeltek még amorf hártáival bevont 30-40 nm-es, heterogén kontrasztú, szabálytalan alakú részecskéket, valamint O-tartalmú kristályos magból és amorf burokból álló 20 nm-es szabálytalan alakú részecskéket is. A 60 nm alatti részecskék zömét nagy szulfáttartalmú szerves aggregátumok alkotják. Ezek több, változó méretű (50-200 nm) lekerekített morfológiájú részecskékből állnak össze, melyek között néhány nm-es távolság van, feltételezhetően a másodlagos részecskénövekedés kezdeti fázisában vannak. A nagy részecskék mellett nagy számban megfigyeltek még 20-40 nm-es homogén kontrasztú egyedi részecskéket, melyek az elektronnyalábban a szulfátra jellemző buborékképződés nélkül szublimáltak.

Gázkromatográfia-tömegspektrometria módszerrel tanulmányozták 8 különböző, laboratóriumi körülmények között tenyésztett mikroszkopikus gombafaj szeszkviterpén emissziós fluxusát. Egyidejűleg a gombák szén-dioxid emisszióját is mérték. A különböző gombafajokra kapott, egységnyi gombatömegre és egységnyi kibocsátott szén-dioxid mennyiségre normált szeszkviterpén emisszió 1-3 nagyságrenddel változott. A vizsgált törzsek közül a *Trichoderma harzianum* bizonyult közepes kibocsátásúnak, mind gombatömegre mind szén-dioxid mennyiségre vonatkoztatva ($6-28 \text{ ng h}^{-1} \text{ g}^{-1}$ $210-570 \mu\text{g mol}^{-1} \text{ CO}_2$). A laboratóriumi eredmények alapján a gombák szeszkviterpén emisszióját összehasonlították a növényzet által kibocsátott szeszkviterpén emisszióval. Bár az eredmények nagy hibával terheltek, az Egyesült Államok délkeleti 12 államára, szeptember

hónapra végzett becslés arra utal, hogy a talajlakó gombaközösségek által kibocsátott szeszkviterpén mennyisége nem elhanyagolható az ezen a területen élő túlevelű vegetáció által kibocsátott szeszkviterpén mennyiséghez képest.

Már meglévő, egy éves adatsor kiértékelésével tanulmányozták, hogy mely meteorológiai és egyéb környezeti paraméterek játszanak szerepet háttérlevegőben bekövetkező részecskekeletkezésben. Megállapították, hogy a részecskeképződés alkalmával jelentősebb a globálsugárzás, mint azokon a napokon, amikor nem volt keletkezés, amely a fotokémiai folyamatok részecskeképződésben játszott szerepére utalhat. Kimutatták, hogy 0°C-nál kisebb napi átlaghőmérséklet esetén részecskeképződés nem, vagy csak nagyon ritkán játszódik le. A légpályák elemzésével azt kapták, hogy a mérőállomáson megfigyelt részecskekeletkezési események leggyakrabban a déli irányú légtömegek esetében következtek be. A déli légtömegek átlagos kén-dioxid koncentrációja nagyobb volt, mint az északiak esetében. Ismeretes, hogy e gáz a részecskeképződés fontos elővegyülete. Az eredmény arra utalhat, hogy a déli légtömegek a kén-dioxid lényeges forrásterületeit érinthetik.

A kutatócsoport tagjai különböző modellek segítségével tanulmányozták a troposzférikus ózon száraz ülepedésének folyamatát. A kiválasztott modelleket elterjedten alkalmazzák számos kutatóintézetben a kémiai terjedési modellek almoduljaiként. A vizsgált ülepedési modellek felépítésüket tekintve azonosak, az ún. ellenállás-módszeren alapulnak, azonban parametrizációik kidolgozottsága eltérő. A vizsgálat fő kérdése az volt, hogy ezen modellek esetén a részletesebb parametrizáció (amennyiben a megfelelő bemeneti adatok rendelkezésre állnak) pontosabb eredményt szolgáltat-e? A modellezett értékeket ezért összevetették mérési eredményekkel, amelyeket külföldi kutatóintézetek munkatársai szolgáltattak. Az ózonülepedést ún. eddy kovariancia-eljárással mérték az amerikai kollégák, az AMERIFLUX hálózat egyik fluxusmérő tornyán, fenyőerdő felett, vegetációs időszakban. A kutatócsoport statisztikai vizsgálatokkal kimutatta, hogy a részletesebb parametrizációval rendelkező modell mutatja a legszorosabb korrelációt a mérésekkel, és annak eredményei közelítik a legjobban a mért adatokat, mind térben, mind időben. A modellparametrizáció pontosítása érdekében a mért ózon ülepedési értékeket a bemeneti meteorológiai és környezeti adatok függvényében is megvizsgálták. Rávilágítottak arra, hogy a talaj nedvességi viszonyai döntő mértékben befolyásolják az ózon ülepedésének mértékét. Ezenkívül tudományterületi újdonságként vizsgálták az ózon fluxus és a szén-dioxid fluxus összefüggéseit az adott ökoszisztéma felett és kimutatták, hogy egyértelmű összefüggés van a két változó között.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport vezetője „Szmog télen-nyáron?” címmel előadást tartott a VI. Nyári Egyetem Középiskolásoknak (Tihany, Somogyi József Művésztelep, 2012. július 2–8.) programjában, valamint „Végtelen ég alatt? – elmélkedés a globális éghajlatváltozásról” címmel az MTA Veszprémi Területi Bizottságának Irodalomtudományi Munkabizottsága által gondozott „A tudomány kultúrája” sorozatban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A kutatócsoport tagjai részt vettek a Légekörnyezet, Környezeti modellek, Bevezetés a környezettanba, Kémiai környezetvizsgáló módszerek, Geostatisztika, Éghajlat, Climatologia, Hidrometeorológia, Hydrometeorology című tárgyak oktatásában, valamint a Kémiai és Környezettudományok Doktori Iskola munkájában.

2012-ben folytatódott az EB által támogatott Aerosols, Clouds, and Trace Gases Research Infrastructure Network elnevezésű 4 éves futamidejű FP7-es projekt, amelyben a kutatócsoport tagjai is aktívan részt vesznek.

Az amerikai National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) intézettel meglévő hosszú távú együttműködés keretein belül a k-pusztai mérőállomáson egy 3 hullámhosszon működő abszorpciós fotométert üzemeltetnek. Az együttműködés részeként 2012-ben egy folyamatos fényabszorpció fotométert (CLAP) telepítettek az állomásra.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása:

A kutatócsoport tagjai aktívan részt vesznek a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0064 azonosítószámú, „Az éghajlatváltozásból eredő időjárási szélsőségek regionális hatásai és a kárenyhítés lehetőségei a következő évtizedekben” című projekt, „Éghajlatváltozás hatása a levegőminőségre” alprojekt (2012–2014, 64,0 M Ft) megvalósításában.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Alves C, Vicente A, Pio C, Kiss G, Hoffer A, Decesari S, et.al. (6): Organic compounds in aerosols from selected European sites – Biogenic versus anthropogenic sources. *Atmospheric Environment*, 59: 243-255 (2012)
2. Buseck P R, Adachi K, Gelencsér A, Tompa É, Pósfai M: Are black carbon and soot the same? *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 12: 24821-24846 (2012)
3. Frka S, Dautovic J, Kozarac Z, Cosovic B, Hoffer A, Kiss G: Surface-active substances in atmospheric aerosol: an electrochemical approach. *Tellus Series B-Chemical and Physical Meteorology*, 64: Paper 18490 (2012)
4. Horváth E, A Hoffer, F Sebők, Cs Dobolyi, S Szoboszlai, B Kriszt, et.al. (1 Gelencsér A): Experimental evidence for direct sesquiterpene emission from soils. *Journal of Geophysical Research*, 117: Paper doi:10.1029/2012JD017781. 5 p. (2012)
5. Turóczi B, Hoffer A, Tóth Á, Kováts N, Ács A, Ferincz Á, et. al.(2 Gelencsér A): Comparative assessment of ecotoxicity of urban aerosol. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12:(16) 7365-7370 (2012)
6. Kováts N, Ács A, Kovács A, Ferincz Á, Turóczi B, Gelencsér A: Direct contact test for estimating the ecotoxicity of aerosol samples. *Environmental Toxicology and Pharmacology*, 33:(2) 284-287 (2012)

MTA–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 2012-ben

A kutatócsoport tagjai az alábbi kutatási feladatok elvégzését tűzték ki célul a 2012-es évre:

Klasszikus analízis: Területmérték szerint vett ortogonális polinomok különböző tulajdonságainak vizsgálata és alkalmazásuk tartomány- rekonstrukcióra. Klasszikus polinom-egyenlőtlenségek (Bernstein-, Szegő-, Videnskii- egyenlőtlenségek) igazolása általános halmazokon. Ezek felhasználásával új típusú egyenlőtlenségek (például a Bernstein-egyenlőtlenség L_p normában éles alakjának) bizonyítása. Polinom-approximáció poliédereken. Egy hosszú ideje megoldatlan probléma teljes feloldása: akárhány dimenzióban a polinom-approximáció hibájának jellemzése megfelelő simasági modulussal. Totik Vilmos sejtésének bizonyítása, amely éles becslést ad polinomok deriváltjaira komplex síkon, görbék és görberendszerek esetén.

Differenciálegyenletek: Funkcionál-differenciálegyenletek esetén a megoldások aszimptotikus viselkedésének vizsgálata. Különböző egyenletek egyensúlyi helyzetei globális attraktivitásának igazolása analitikus módszerek és megbízható numerikus eljárások kombinálásával. Egy bizonyos, mesterséges neuronhálózatokat modellező funkcionál-differenciálegyenlet összekötő pályái dimenziójának meghatározása. Olyan SEAIR- típusú járványtani modellek tanulmányozása, melyek az influenza terjedését szimulálják több távoli, légi közlekedés által összekapcsolt régió között, ha a járvány utazás közben is terjedhet.

Valószínűség számítás: Önnormalizált összegek határeloszlásainak, ill. részsorozaton vett határeloszlásainak vizsgálata, aszimptotikus viselkedésének megértése. Egy, Tóth Bálinttól származó, sztochasztikus geometriai probléma vizsgálata: egy véletlen geometriai folyamat határalakzatának jellemzése, a folyamat sebességének meghatározása.

Az elért eredményeket a kutatócsoport tagjai közzé teszik rangos nemzetközi folyóiratokban, konferencia ill. szemináriumi előadásokon keresztül. Emellett a tagok kurzusok tartásával segítik az SZTE Bolyai Intézetében folyó oktatást.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Klasszikus analízis:

[1] harmonikus mértékek sűrűségének konvexitását igazolja olyan halmazokra, amelyek egy körön vagy egy egyenesen fekszenek. Következésképp adódik hasonlóan elhelyezkedő halmazok egyensúlyi mértékének konvexitása minden rész-íven ill. rész-intervallumon.

A [2] dolgozat az operációelmélet témaköréhez tartozik, és bizonyos kontrakciók invariáns altereinek struktúrájával foglalkozik. Azt bizonyítja, hogy kontrakciók egy széles osztályának minden T eleméhez van egy jóval szűkebb osztálybeli T_1 kontrakció ami vele felcserélhető, és így információ nyerhető az altérhálójukról. A T_1 operátor a T egy H -függvényeként adódik. A megfelelő függvény létezésének igazolása potenciáleméleti módszerekkel történik.

[3] egyszerű módszerrel igazolja, hogy egy (polinomokra ill. trigonometrikus polinomokra vonatkozó) Bernstein-típusú egyenlőtlenség mindig maga után von egy erősebb, Szegő-típusú egyenlőtlenséget, és ennek több alkalmazását is tárgyalja a dolgozat. Az is igazolásra került, hogy az eredeti Bernstein-egyenlőtlenségből nagyon egyszerűen következik a fél évszázaddal

később keletkezett Videnskii- egyenlőtlenség (amely a Bernstein-egyenlőtlenség megfelelője egy részintervallumon), majd e két dolog kombinálásával a Videnskii- egyenlőtlenség messzemenő általánosítása került igazolásra szimmetrikus halmazokon.

[4] azt a problémát tanulmányozza, hogy egy analitikus görbékkel álló rendszeren az ún. n -edik Csebisev- szám milyen közel kerülhet az elméleti alsó korláthoz. Az is megvizsgálásra került, hogy a görberendszer milyen jól approximálható lemniszkatákkal a Hausdorff távolságban. A bizonyítások potenciálméleti eszközöket használnak; a háttérben harmonikus mértékek szimultán Diofantoszi approximációja áll.

Az [5] cikk nem szimmetrikus intervallumon gyorsan csökkenő polinomokat vizsgál, és Christoffel függvényekre valamint polinomok zérushely-távolságára ad pontos becsléseket.

A [6] dolgozat azt a kérdést vizsgálja, hogy ha egy görbével határolt tartományt nézünk, akkor a határon levő zérushelyek hogyan befolyásolják egy n -ed fokú polinom minimális szuprénum normáját. A cikk a norma növekedésére pontos becsléseket ad.

[7] összefoglaló dolgozat az ún. polinomiális inverz-kép módszert ismerteti, amellyel intervallumokra ill. körökre ismert klasszikus tételeket átvihetünk általános kompakt halmazokra.

A komplex síkon levő m mértékekre vonatkozó ún. m -reguláris pontok fontos szerepet játszanak az ortogonális polinomok elméletében. A [8] dolgozat megoldja Levin és Lubinsky egy reguláris pontokra vonatkozó problémáját.

A [9] dolgozat azt mutatja be, hogy gyorsan csökkenő polinomok és duplázó mértékek milyen szerepet játszanak az ortogonális polinomok elméletében.

Valószínűség számítás:

[10] fő eredménye az, hogy az önnormalizált összegek részsorozatokon vett határeloszlásai pontosan akkor folytonosak, ha a mögöttes eloszlás a centrált Feller osztályba tartozik. Bár a cikk nem oldja meg Breiman eredeti sejtését, bizonyít néhány meglepő eredményt az önnormalizált összegekkel kapcsolatban, melyek segíthetnek a sejtés belátásában.

[11] az alábbi problémát vizsgálja: Egyenletes eloszlás szerint választunk egy véletlen pontot egy intervallumban, majd tekintjük azt az egységnyi intervallumot, aminek ez a pont a középpontja. Az eredeti és az egységnyi intervallum metszeteként előállt intervallummal folytatjuk az eljárást. A szerzők igazolják, hogy a határintervallum középpontjának eloszlása arkusz-színusz eloszlású, továbbá határeloszlás- tételt bizonyítanak a folyamat sebességére is.

Differenciálegyenletek:

[12] egy általános járványterjedési modellt mutat be, mely tetszőleges számú, egymással légiközlekedéssel összekapcsolt régióban írja le fertőző betegségek terjedését. A fertőzés utazás közben is terjedhet. A szerzők megmutatják, hogy a modell ekvivalens egy speciális alakú késleltetett differenciálegyenlet-rendszerrel, továbbá igazolják a rendszer megoldásának létezését és egyértelműségét.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai 2012-ben öt matematikát népszerűsítő előadást tartottak az Eötvös Loránd Kollégiumban, a Bolyai Intézet Egyetemi Tavasz rendezvényén és a Radnóti Miklós Gimnáziumban. A matematika szak népszerűsítéséhez beiskolázási körúton való részvétellel, és a Bolyai Intézet honlapján olvasható felvételi propagandaanyag készítésével járultak hozzá.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A *Workshop on Potential Theory and Applications* a kutatócsoport támogatásával került megrendezésre Szegeden, 2012. május 28. és 31. között. Kutatócsoporti tagok vettek részt a

6th European Congress of Mathematics illetve The Second Conference of PhD Students in Mathematics rendezvények megszervezésében.

A tagok 2012-ben számos előadást tartottak konferenciákon és egyetemi szemináriumokon, köztük az alábbiakon (a teljes lista: www.math.u-szeged.hu/MTA/eloadasok.html):

New Trends in Approximation Theory (plenáris előadás), Ein Gedi, Izrael, *ICMC Summer Meeting on Differential Equations* és *Summer School of the ICMC Summer Meeting on Differential Equations* (plenáris előadás és előadássorozat), Sao Carlos, Brazília, City University of Hong Kong / Beijing Normal University / Zhejiang University, Kína *INdAM Meeting on Recent trends in delay differential equations: models, theory and numerics* (meghívott előadás), Cortona, Olaszország, *Dynamics of Patterns Workshop*, Oberwolfach, Németország.

A csoport tagjai a Bolyai Intézettel való együttműködés keretében kurzusokat tartanak, szakdolgozók illetve doktorandusz hallgatók témavezetői.

A Bolyai János Matematikai Társulat Szele Tibor emlékérmét idén a csoportvezető kapta. Egy kutató „Legjobb poszter” díjat kapott a 6th European Congr. of Mathematics c. konferencián.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport nem pályázott más támogatásra. Kevei Péter OTKA posztdoktori pályázaton 2,88 M Ft-ot nyert *Sztochasztikus folyamatok aszimptotikája* címmel a 2012. szept. 1. és 2015. aug. 31. közötti időszakra.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Benko D, Dragnev P, Totik V: Convexity of harmonic densities. *Rev Mat Iberoam*, 28:(4) 947-960 (2012)
2. Kérchy L, Totik V: Compression of quasianalytic spectral sets of cyclic contractions. *J Funct Anal*, 263:(9) 2754-2769 (2012)
3. Totik V: Bernstein-type inequalities. *J Approx Theory*, 164:(10) 1390-1401 (2012)
4. Totik V: Chebyshev polynomials on a systems of curves. *J D'analyse Math*, 118: 317-338 (2012)
5. Totik V, Varga T: Non-symmetric fast decreasing polynomials and applications. *J Math Anal Appl*, 394:(1) 378-390 (2012)
6. Totik V: Polynomials with zeros and small norm on curves. *Proc Amer Math Soc*, 140: 3531-3539 (2012)
7. Totik V: The Polynomial Inverse Image Method, In: *Approximation Theory XIII: San Antonio 2010*, New York: Springer, 2012. pp. 345-365
8. Totik V: The size of irregular points for a measure. *Acta Math Hung*, 136:(3) 222-231 (2012)
9. Totik V: Fast decreasing and orthogonal polynomials, In: *Recent advances in orthogonal polynomials, special functions, and their applications*. Providence: American Mathematical Society, pp. 241-254
10. Kevei P, David M: The asymptotic distribution of randomly weighted sums and self-normalized sum. *Electron J. Probab*, 17:(46) 1-21 (2012)
11. Ambrus G, Kevei P, Vigh V: The diminishing segment process. *Stat Probabil Lett*, 82:(1) 191-195 (2012)
12. Knípl DH, Röst G: Multiregional SIR Model with Infection during Transportation. *Biomath*, 1:(1) 1-7 (2012)

MTA–SZTE BIOSZERVETLEN KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Kiss Tamás, az MTA doktora
6720 Szeged, Dóm tér 7.; 6701 Szeged, Pf. 440
telefon: (62) 544 337, 544 340; fax: (62) 420 505
e-mail: tkiss@chem.u-szeged.hu; honlap: <http://www2.sci.u-szeged.hu/bioinorg>

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-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 szerek – vanádium (IV,V), réz (II), cink (II), ruténium (II,III), vas (III), alumínium (III) komplexek – előállítás, és azok kölcsönhatásainak vizsgálata biológiai rendszerekben. Aktuális előfordulásuk (biospeciációjuk), a szervezetben való lehetséges átalakulásaik és biológiai hatásuk megismerése céljából.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Gyógyászati bioszervetlen kémia

A neurodegeneratív betegségekben potenciálisan felhasználható fémionokra alapozott terápiás szerek kifejlesztése

Két újabb szubsztituált hidroxipiridin karbonsav Zn(II), Cu(II), Fe(III) és Al(III) kötő képességét vizsgálták, e fémionok megbomlott homeosztázisa helyreállítására való felhasználhatóság céljából. A korábban vizsgált hasonló ligandumok közül ezek bizonyultak a legerősebb komplexképzőknek, de stabilitásuk még így sem érte el a gyógyászatban használt deferripron Fe(III) és Al(III)ionnal alkotott komplexeinek stabilitását. A Cu(II)- β -amiloiddal való kölcsönhatása biztató alkalmazást nyerhet az Alzheimer-kór előrehaladásának megakadályozásában.

Rákellenes hatású ruténium(II,III), vanádium(IV,V), gallium(III) és réz(II) komplexek

A már klinikai fázis I vizsgálatokba jutott trisz-8-hidroxi-kinolináto-Ga(III) (KP46) és trisz-maltoláto-Ga(III) komplexek és (O,S) származékaik részletes biospeciációs jellemzését adták. Fluorescens mikroszkópiásan megoldották a fiziológiás pH-n és igen kis koncentrációban is domináns KP46 sejten belüli eloszlásának monitorozását. Másrészt vizsgálták a klinikai fázis I-en túljutott Ru(III)-komplexek kölcsönhatását humán szérumban albuminnal kötőhely marker molekulák bevonásával. Valamint potenciálisan aktív (O,O) donor atomokat tartalmazó ligandumok Ru(II)-című komplexeinek oldategyensúlyi viszonyait is jellemezték.

Az antitumor hatású tioszemikarbazonok témakörében egyrészt rámutattak arra, hogy az (O,N,S) donor atomokat tartalmazó \square -N-piridil tioszemikarbazonok és az (O,N,O) szalicilaldehid tioszemikarbazonok (STSCs) komplexképző sajátossága jelentős különbségeket mutat a képződő komplexek stabilitására vonatkozóan az egyes fémionok esetén. Az (O,N,S) STSCs jóval kisebb biológiai aktivitásának az egyik lehetséges oka a hatásmechanizmus szempontjából fontos Fe(II)komplexek kisebb stabilitása. Másrészt egy Pro-tartalmú

vízoldható enantiomer pár STSC vizsgálata során megállapították, a koordinációs módjuk alapvetően nem különbözik az alapvegyülethez képest, mert a Pro nem vesz részt a fémion kötésében. A ligandumok citotoxikussága messze alulmarad a Cu(II) komplexeinek biológiai aktivitásával szemben. Az előzetes eredmények alapján ezen komplexeknek a topoizomeráz II α enzim a fő target molekulája.

Fémionok és fémkomplexek katalitikus hatásán alapuló gyógymód genetikai hibák korrekciója révén

Egy biztonságosan működő, specifikus mesterséges metallonukleáz enzim kifejlesztésének lehetőségét tanulmányozták. Az új enzim alapját a Colicin E7 nukleázból származó C-terminális HNH motívum képezi, mely a természetes nukleáz doménban az N-terminális rész allostérikus aktiváló szabályozása alatt áll. Ennek megőrzéséhez meg kell ismerni a ColE7 nukleáz domén (NCole7) N- és C-terminális részei között kialakuló kölcsönhatásokat, és ezek átalakításának lehetőségeit. Ennek érdekében az NCole7 több, N-terminális részen módosított mutánsának génjét tervezték meg és alakították ki. Ezek közül néhányat sikerült előállítaniuk és tisztítaniuk e folyamatok optimalizálása után. A domén 4, illetve 25 aminosavval rövidített mutánsait tanulmányozták. Az eredmények azt mutatták, hogy míg mindkét fehérje elveszíti katalitikus aktivitását, addig a hosszabb fehérje mind a cinkiont, mind pedig a szubsztrát DNS molekulát erősen köti. Ugyanakkor a rövidebb fehérje még a cinkionok 20-szoros feleslegének jelenlétében sem telítődik fémionnal. A hosszabb mutáns egy variánsából sikerült egykristályt növeszteni, melynek röntgendiffrakciós vizsgálatát is elvégezték és hamarosan publikálják. Megállapították azt is, hogy maga 43 tagú HNH motívum nem képes a DNS molekulát megkötni és hidrolizálni, illetve a fehérje méretének fokozatos növelésével igazolták, hogy az N-terminális rész jelenléte szükséges a fehérje funkciójának ellátáshoz. A továbbiakban pontmutációk révén derítik ki, hogy az N-terminuson mely aminosavak szükségesek mindenképp a katalitikus aktivitás kialakulásához, illetve ezek milyen hatást fejtenek ki a fémion, illetve szubsztrát megkötésére.

Metalloenzimek szerkezeti és funkcionális modellezése, mesterséges enzimek kifejlesztése

Biomimetikus enzim modellek kifejlesztése tripodális metallopeptidek révén

Hét különböző tripodális TREN vagy triamino-ciklohexán alapú piridin-származékot állítottak elő és vizsgálták 3d5-3 d10 átmenetifém komplexeinek képződését. Az oldategyensúlyi vizsgálatok és kezdeti szerkezeti vizsgálatok arra engednek következtetni, hogy a tripodális ligandum harmadik lába csak nagyon gyengén koordinálódik, ami ígéretes lehet a hidroláz aktivitáshoz.

A vanádiumfüggő haloperoxidáz enzimek szerkezeti és funkcionális modellezése

Ebben a témában ebben az évben érdemleges eredményre nem jutottak.

Fémionszabályzó fehérjék modellvegyületei

Előállították a *V. cholerae* CueR fémionszabályzó fehérje fémkötő szakaszát képező oligopeptidet (Ac-SCPGDQGSDCPI-NH₂, PP), illetve annak egy aminosavban módosított verzióját (Ac-SCPGDQGSDCSI-NH₂, PS). A vegyületek vizsgálatával részben a CueR fehérjék fémionszenzor jellegű hatékony fémion megkötésének és szelektivitásának jobb megértését, valamint toxikus fémionok akkumulációjára és/vagy érzékelésére alkalmas vegyületek kifejlesztését célozták meg. A ligandumok extrém erős affinitást mutatnak Hg(II)ionokhoz, de hatékonyan kötik a Cd(II)-t és Zn(II)-t is. Kompetíciós vizsgálatokkal igazolták, hogy cink(II)ionok jelenléte nem képes megakadályozni Cd(II) és Hg(II)ionok koordinációját az Ac-SCPGDQGSDCSI-NH₂ összetételű oligopeptid tiolát donorcsoportjaihoz.

b) Tudomány és társadalom

Eredményeiket igyekeznek a társadalom, tudomány iránt érdeklődő rétegei számára is megismerhetővé tenni. A kutatócsoport tagjai előadások tartásával rendszeresen részt vesznek a Kémiai Konferencián. A kutatócsoport vezetője évente több alkalommal tart kísérleti bemutatókat a város középiskolaiban, és a Magyar Kémikusok lapjának főszerkesztőjeként folyamatosan törekszik a kutatási eredmények szakmai népszerűsítő formában való terjesztésére.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Folytatódtak korábbi eredményes nemzetközi kapcsolataik európai és tengerentúli kutatóhelyekkel. Ezek közül eredményesség szempontjából a közelmúltra vonatkozólag a bécsi és a padovai egyetemmel való kapcsolatuk kiemelésre méltó.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A TAMOP 4.2.2.A. pályázati fordulóban részben sikerrel szerepeltek és nyertek jelentősebb forrást az 1.1. munkatervi pont támogatására. A magyar–román regionális pályázaton nyertek el jelentős támogatást a csoport munkatársai az 1.3. és a 2.3. témák támogatására. Sajnos az FP7 pályázatokon résztvevőként való indulásaik (két pályázatban is) nem jártak szerencsével ez évben sem. Továbbra is gyümölcsöző és igen eredményes a kapcsolatuk Prof Bernhard Keppler kutatócsoportjával a bécsi egyetemen. Ennek kétoldalú egyezményrel is megerősített anyagi bázisa van. A padovai egyetemmel való együttműködés anyagi hátterét eddig az MTA-CNR szerződés biztosította, ennek megújítására pályázatuk van folyamatban.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kiss T, Jakusch T, Gyurcsik B, Lakatos A, Enyedy É A, Sija É: *Coordination Chemistry Reviews*, 256(1-2): 125-132 (2012)
2. Enyedy É A, Zsigó É, V. Nagy N, Kowol C R, Roller A, K. Keppler B, Kiss T: *European Journal of Inorganic Chemistry*, 4036-4047 (2012)
3. N. M. Milunovic M, Enyedy É A, V. Nagy N, Kiss T, Trondl R, A. Jakupec M, K. Keppler B, Krachler R, Novitchi G, B. Arion V: *Inorganic Chemistry* 51(17): 9309-9321 (2012)
4. Enyedy É A, Dömötör O, Varga E, Kiss T, Trondl R, G. Hartinger C, B. Keppler B: *Journal of Inorganic Biochemistry*, 117: 189-197 (2012)
5. Sija É I, Dean A, Jakusch T, B Di Marco V, Venzo A, Kiss T: In: Wolfgang Linert, Henryk Kozlowski (szerk.) *Metal Ions in Neurological Systems*. Wien: Springer, 2012. pp. 199-210. (ISBN:978-3-7091-1000-3)

MTA–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 2012-ben

A csoport kutatási témakörei alapvetően nem változtak az előző évekhez képest. A fő irányt továbbra is a nyelvtechnológia jelentette, valamint az önszervező rendszerek, mely téma–körben egy nagyon jelentős, 2012 decemberében induló TÁMOP projektet nyert el a csoport. Emellett folytatódtak a beszédfelismerési kutatások, valamint a gépi tanulás elmélete és alkalmazásai témakörében korábban megkezdett kutatások is új eredményekhez vezettek.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Természetes nyelvi feldolgozás. A nyelvtechnológiai csoport munkálatai 2012-ben is több területen folytak. A kutatások egyfelől egy magyar nyelvi szintaktikai elemző létrehozását célozták meg, másfelől különböző, valós életbeli alkalmazásokkal kapcsolatos problémákat oldottak meg gépi tanulási módszereket felhasználva, elsődlegesen az automatikus kulcsszó-kinyerés, információkinyerés és többszavas kifejezések automatikus azonosítása terén. A magasabb szintű nyelvtechnológiai kutatásokhoz és fejlesztésekhez elengedhetetlen a magyar nyelvű szövegek nyelvi előfeldolgozása. E téren a csoport kutatói kísérleteket folytattak a magyar nyelv automatikus szintaktikai elemzése területén, aminek eredményeképpen a korábbi években létrehozott, magyarlanc nevű programcsomagot kibővítették egy szintaktikai elemzővel is. A csoport tevékenységének egy része új, kézzel annotált szöveges adatbázisok létrehozására irányult. Így jött létre a HunLearner korpusz, amely idegen ajkúak által produkált magyar nyelvű szövegeket tartalmaz. A korpusz segítségével megtörténtek az első lépések a morfológiai és szintaktikai hibák automatikus javítása felé is. A szövegek szemantikai feldolgozását kívánó feladatok nagy többségében a kiértékelés mikéntje nem magától értetődő, ezért a kutatócsoport a véleményorientált kulcsszó kinyerés példáján keresztül adott egy megoldást a feladat szubjektivitásának csökkentésére és a kiértékelési folyamat megkönnyítésére. A többszavas kifejezések olyan lexikai egységek, melyek több szövegszóból állnak, azonban szintaktikai, szemantikai, pragmatikai vagy statisztikai szempontból sajátos viselkedést mutatnak. A csoport kutatói vizsgálták, hogy a többszavas igék lexikai reprezentációja hogyan valósul meg az angol és magyar nyelvű lexikai adatbázisokban (wordnetekben), és javaslatot tettek azok egységes kezelésére. A MASZEKER projekt szabadalmak gépi feldolgozását célozta meg, a záró szakaszban a kidolgozott módszerek hatékonyságát egy angol nyelvű szabadalmakból álló korpuszon vizsgálták a csoport kutatói, amely több nyelvi szinten tartalmaz kézi annotációt (pl. sekély szintaktikai elemzés, névelemek). Kvantitatív nyelvészeti kutatások keretében megvizsgálták a Szeged Dependencia Treebank alapján a magyar nyelvre jellemző szófaji és szintaktikai viszonyok eloszlási mintázatát is, ami későbbi doménadaptációs vizsgálatok alapjait jelentheti. A treebankben található szintaktikai viszonyok kinyerése megnyitotta az utat egy korpuszalapú, magyar nyelvű igei vonzatkerettár létrehozása felé is. A projekt záró munkaszakaszában a keresőrendszer prototípusának végleges formába öntése történt meg, mind a szabadalmi keresés, mind a néprajzi keresés területén. A MASZEKER projekt 2012 szeptemberében sikeresen lezárult.

Beszédfelismerés. Az utóbbi évek slágertémája a beszédfelismerésben az ún. mély neuronháló. Ezekkel akár 10% felismeréspontosság-növekedés érhető el, nagy műveletigényük

miatt azonban speciális, grafikus kártyán (GPU) futó implementációt igényelnek. Ez az irányvonal szerencsésen kapcsolódik a csoport korábbi kutatásaihoz, így a 2012-es évet neuronhálós szoftverek mély neuronhálókhöz és GPU-n való futáshoz igazítására szentelték a csoport kutatói. A kezdeti eredmények ígéretesek, viszont publikálásuk már átcúsúzott 2013-ra.

Mintafelismerés és gépi tanulás. A Ruhr-Universität Bochum kutatóival közös MÖB-DAAD pályázatban a csoport kutatói folytatták annak vizsgálatát, hogy mennyire különböző teljesítmény várható el egy tanulóalgoritmustól ismert, illetve ismeretlen eloszlásból származó minta esetén. Az elért eredmények lezárják a kérdéskör legégetőbb nyitott kérdését, igazolva, hogy az eloszlás ismerete összehasonlíthatatlanul nagy előnyt jelenthet a tanuló számára. Emellett az ún. többpéldás (multi-instance) modellt vizsgálták a csoport kutatói, ahol az algoritmus példák helyett példahalmazokból tanul. E témában egy alapvető tanulási feladatra, félterek tanulására adtak információs és bonyolultsági eredményeket. Tudásreprezentáció témakörben folytatódott a Horn-formulák vizsgálata. Az eredmények a formulaméret minimalizálása és formulák revíziója témakörökben a minimumra adható kombinatorikus alsó és felső korlátok hatékony algoritmusaihoz, továbbá az AGM-elmélet Horn esetre való adaptációjához kapcsolódnak. Véletlen formulákkal kapcsolatban pedig a fázisátmenet (phase transition) jelensége volt a kutatások tárgya. A hétköznapi gondolkodás témakörben egy benchmark feladatot fogalmaztak meg a csoport kutatói: gyerekek számára készített intelligenciatesztek megoldását vizsgálták egy nyilvános tudásbázisra (ConceptNet) épülő algoritmusok segítségével. Kifejlesztettek emellett egy megerősítéses tanuláson alapuló módszert, amely összetett tanulók, pl. boost-olt döntési fák gyors kiértékelését teszi lehetővé. A korábban kifejlesztett boosting programcsomagot szabadon elérhetővé tették és főbb jellemzőit publikálták. Emellett kifejlesztették az AdaBoost meta-tanuló algoritmus egy adaptációját P2P hálózatokra.

Önszervező rendszerek. A Qlectives projektben folytatódott a munka a teljesen elosztott környezethez kidolgozott gossip learning framework (GOLF) platformon, amelynek lényege, hogy az adatok helyett az adatokat leíró modellt mozgatjuk egy véletlen séta formájában. Ennek során az adatmodell érinti az egyes peereket, és a modellt kis mértékben módosítja az adott peeren található adatok segítségével. Ez nem más, mint a jól ismert on-line tanulás alkalmazása, ahol a sétáló modell végez on-line tanulást a meglátogatott adatok segítségével. A csoport kutatói kidolgozták a boosting algoritmus GOLF-változatát többváltozós esetre, valamint a GOLF-keretrendszer adaptivitását is vizsgálták. Kidolgoztak több módszert is az adaptivitás megőrzésére az időben változó modell esetére. Az első módszer lényege annak biztosítása, hogy bármely időpontban a hálózatban található modellek életkora egy adott eloszlást kövessen, így elkerülve a beégés jelenségét, amikor egy túl régi modell már képtelen fejlődni. A másik módszer lokálisan detektálja a forgalom változását, változás esetén eldobja az aktuális modellt és újat indít. Szintén a Qlectives projekt keretében elkészült egy GOLF-alapú spam-szűrő, mely a Tribler keretrendszerbe lett integrálva. Tanulóalgoritmusok mellett a hálózat alacsonyabb rétegeinek algoritmusai is foglalkoztak a csoport kutatói: olyan peer mintavételező algoritmust javasoltak, amely képes tolerálni a sok NAT-eszközt tartalmazó hálózati környezetet. Végül pedig egy teljesen elosztott gráfpaticionálási algoritmust is megadtak, amely lokális operátorok segítségével evolvál egy, a hálózatban reprezentált partíciónálást. Az algoritmus alkalmas gráf struktúrájú nagyméretű adatbázisok partíciónálására, ezáltal optimálisan rendelkezhet adatközpont-lokációkhoz az egyes rekordok.

Mesterséges intelligencia a szoftvermérnökségben: A csoport folytatta kutatásait a szoftverrendszerek hibáinak elemzése terén, a korábbi években bevezetett SEA (Static Execute After) relációt felhasználva. Ennek segítségével automatikusan megadhatók egy változtatás hatásainak ún. hatáshalmazai. Ez az eljárás hatékonyan számolható, így nagy ipari rendszerek (pl. a nyílt forrású WebKit) esetében is alkalmazható. A csoport kutatói részletesen vizsgálták az eljárást, illetve a konkrét implementáció előnyeit. A Webkit projekten végzett elemzéssel igazolták, hogy az általuk adott eljárást alkalmazva előre jelezhető a változáspropagáció

szükséges lépései, ezáltal csökkenthető a fejlesztés közben megjelenő regressziós hibák száma. Azt is megmutatták, hogy a hibák nagy része felderíthető a SEA halmazok segítségével, még akkor is, ha ezek jelentős része nagy halmaz. Megmutatták, hogy ez utóbbi tulajdonság bizonyos esetekben nem zavaró, például a teszt esetek prioritizálásánál, bár általánosságban megnehezítheti az impaktanalízis hatékony felhasználását. Vizsgálták emellett a kódban kialakuló függőségi klaszterek hatását a hatásanalízis eredményére, valamint folytatódott az osztályok hibahajlamosságának termékmetrikákból való becslésének kutatása objektumorientált környezetben. A szerkezeti metrikák mellett fogalmi metrikákat is bevontak a vizsgálatokba, melyek kisebb számításigénnyel közelítik a szerkezeti metrikák eredményeit. A WebKit böngészőmotor visszatervezésével ipari méretben is sikerült elvégezni a kísérleteket.

b) Tudomány és társadalom

Az NLP Meetup csoport a magyarországi nyelvtechnológusok, illetve az érdeklődő közönség közötti eszmecserének és együttműködésnek elősegítését tűzte ki célul – mind az akadémiai, mind az ipari szféra oldaláról. Az évente több alkalommal tartott összejöveteleken a szegedi nyelvtechnológiai csoport is képviseltette magát, előadások és laptopos bemutatók keretében ismertetve számítógépes nyelvészeti kutatásainak eredményeit a nagyközönség számára.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

A csoport egy kutatója a nyarat Stockholmban töltötte a SICS vendégkutatójaként, egy másik posztdoktori pályázatot nyert az INRIA Lille-i kutatóközpontjába, egy harmadik pedig öt hónapot töltött az Universität Trier egyetemen DAAD-ösztöndíjjal. Egy kutató az Universidad di Almeria egyetemről érkezett a csoporthoz. Egy MÖB-DAAD pályázat keretében kutatócsere történt a bochumi Ruhr-Universitätrel. A csoport három kutatója vesz részt az SZTE TTIK Informatika Doktori Iskolájának tevékenységében témavezetőként, illetve előadóként.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport egy kutatója vezeti a TÁMOP 4.2.2.C-ben elnyert FuturICT.hu nevű projektet 1,6 milliárd forint támogatással, a konzorcium tagjai az SZTE, a DEAK Zrt, a Viking Zrt. és az ELTE. Indulás: 2012.12.01, tartam: 24 hónap. A projekt témája olyan komplex társadalmi folyamatok modellezése, mint a pénzügyi rendszerek, járványok, klímaváltozás.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Diochnos DI, Sloan RH, Turán Gy: On multiple-instance learning of halfspaces. *Information Processing Letters*, 112: 933-936 (2012)
2. Buckingham S S, Aberer K, Schmidt A, Bishop S, Lukowicz P, Jelasity M et al. (20): Towards a global participatory platform. *The European Physical Journal Special Topics*, 214(1):109–152 (2012)
3. Naranjo J A M, Casado L G, Jelasity M: Asynchronous privacy-preserving iterative computation on peer-to-peer networks. *Computing*, 94(8–10):763–782 (2012)
4. Ormándi R, Hegedűs I, Jelasity M: Gossip learning with linear models on fully distributed data. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, (2012)
5. Szarvas Gy, Vincze V, Farkas R, Móra Gy, Gurevych I: Cross-Genre and Cross-Domain Detection of Semantic Uncertainty. *Computational Linguistics – Special Issue on Modality and Negation*, 38(2): 335-367 (2012)

MTA–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 2012-ben

A Kutatócsoport 2012-ben is folytatta a tervezett aszimmetrikus szintézisek újabb feladatainak kutatását, a reakciók sztereokémiájának és mechanizmusának vizsgálatát. A folyamatosan végzett kutatási eredményekből 2012-ben összesen 21 közlemény jelent meg nemzetközi elismertségű folyóiratokban. Ezek a közlemények főként a gyógyszerkémia, az enzimkatalízis, valamint az enantioszelektív heterogén katalitikus hidrogénezés újabb eredményeit ismertetik.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A módosított Mannich reakcióban 2-naftolból, o-nitrobenzaldehidből és védett ammóniából kiindulva előző kutatások során az 1-(amino(2-aminofenil)metil)-2-naftol szintézisét valósították meg. Annak érdekében, hogy megvizsgálják az így nyert trifunkciós vegyület reakciókészségét dialdehidekkel, a diamint glutárdialdehiddel reagáltatták és piperidinnel-kondenzált kinazolino-naftoxazint izoláltak. Az analóg policiklusos vegyület szintézisének érdekében az 1-(amino(2-hidroxifenil)metil)-2-naftolt reagáltatták glutárdialdehiddel, melynek során piperidinnel-kondenzált benzoxazinonaftoxazint állítottak elő.

A biciklusos *cisz* illetve *transz* laktonokra, valamint az etil-*cisz*-2-aminociklohex-3-én karboxilátra történő acetonitril-*N*-oxid 1,3-dipoláris cikloaddíciójával, teljes regio- és sztereoselektivitással állították elő az izoxazolin gyűrűvel kondenzált ciklusos β - aminosav származékokat. Az izoxazolin gyűrű redukív nyitásával (NaBH₄-del NiCl₂ jelenlétében) a kapott vegyületeket szelektíven továbbalakították a megfelelő multifunkcionalizált ciklusos β -aminoésztereké. Az ily módon előállított aminoalkoholokat Deoxo-Fluor reagenssel átalakították a megfelelő fluorozott származékokká.

Vizsgálták telítetlen karbonsavak, egyes aktivált ketonok és néhány dihidroizokinolin-vázis vegyület enantioszelektív hidrogénezését cinkona alkaloidokkal módosított Pd-, Pt- illetve Ru(II)-katalizátorokon. A telítetlen karbonsavakkal folytatott kutatások kiterjedtek a nem királis amin adalékok hatásának vizsgálatára (*E*)-2-metil-2-buténsav és (*E*)-2-metil-2-hexénsav enantioszelektív hidrogénezésében cinkonidinnel módosított Pd/Al₂O₃ katalizátoron. Az eredmények arra utaltak, hogy a nem királis amin is részt vesz az enantioszelektivitásért felelős felületi átmeneti komplex képződésében. (*E*)-2-metil-2-hexénsav hidrogénezésében sikerült az enantioszelektivitást 71%-ra növelni, ami alifás telítetlen savak hidrogénezésében az eddig elért legnagyobb érték királisan módosított heterogén katalizátoron.

Tanulmányozták reaktív szubsztituenseket tartalmazó (*E*)-2,3-difenilpropénsav származékok enantioszelektív hidrogénezését is. Nitro csoporttal szubsztituált savak hidrogénezése szelektíven a megfelelő aminoszubsztituált telített savakat eredményezte, kivéve a 3-(2-nitrofenil) származékokat, amelyek intramolekuláris amidképzéssel a megfelelő 3-fenil-1,2,3,4-tetrahidro-2-kinolonok keletkezéséhez vezettek. A megjelent közlemény az első volt, amelyben 3-fenil-1,2,3,4-tetrahidro-2-kinolonok enantioszelektív heterogén katalitikus

előállítását írták le, ugyanakkor egy vonzó módszert mutatott be optikailag tiszta 3-(4-aminofenil)-2-fenilpropánsavak kinyerésére.

A vizsgálatokat kiterjesztették hidroxil csoportokkal szubsztituált (*E*)-2,3-difenilpropénsav származékok enantioszelektív hidrogénezésére is. Összehasonlították a savas jellegű hidroxil csoportok hatását az azonos helyzetben található metoxil csoportokéval. A munka során bizonyították, hogy a cinkonidinnel módosított Pd katalizátor alkalmas számos hidroxil szubsztituált 2,3-difenilpropionsav származék előállítására jó optikai tisztasággal, kiterjesztve a katalitikus rendszer alkalmazhatóságát egy újabb típusú királis építőelem kinyerésére.

Az aktivált ketonok közül a metilbenzoilformát (MBF)-, a piruvaldehid-dimetilacetát (PA)- és a 2,2,-diacetofenonból (DAP)-ból készült 3-binér elegy kompetitív enantioszelektív hidrogénezését tanulmányozták cinkonidinnel módosított Pt/Al₂O₃ katalizátorokon állóágys átáramoltatásos rendszerű reaktorban. Bizonyos esetekben új, szokatlan jelenséget tapasztaltak: lassú reakció, nagy optikai tisztaságú termék. Ez a megfigyelés további vizsgálatok fontosságára hívja fel a figyelmet.

Immobilizált Ru(II) aminophosphane-(*S,S*)-Ts-DPEN komplex katalizátorok kiemelkedően nagy enantioszelektivitást mutattak (96-97%-os optikai tisztaság) a dihidroizokinolinok hidrogénezésében.

b) Tudomány és a társadalom

Az előállított új vegyületek a szintetikus szerves vegyiparban és különösen a gyógyszeriparban fontos többfunkciós királis biofor építőelemek előállítását jelenthetik.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Sikeres Baros Gábor pályázatot nyertek az MTA-SZTE Keringéscsökkentőfarmakológiai Kutatócsoporttal közösen: Aritmiák és szívelégtelenség kezelésére alkalmas Na⁺/Ca²⁺ kicserélő gátlók szintézise és gyógyszerjelöltté fejlesztése 2010. 06. 01.-2012. 05. 31. A kutatócsoport továbbra is szoros kapcsolatot ápol a potsdami egyetem kémiai intézetével, Erich Kleinpeter professzorral, akivel a 2011-ben lezárult sikeres bilaterális MÖB-DAAD együttműködés ellenére, 2012-ben is folytatódott az együttműködés. Sikeres együttműködés folyik a Turku Svéd Egyetem (Åbo Akademi University) Szerves Kémia Tanszékén. A kutatócsoport néhány tagja részt vesz a Gyógyszerkémiai és a Szerves Kémiai tanszékeken folyó oktató munkában: projektmunkák irányításában, valamint a doktori képzésben.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport kutatásait az Országos Tudományos Kutatási Alap támogatta (K72065, K75433, NK81371).

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Csütörtöki R, Szatmári I, Koch A, Heydenreich M, Kleinpeter E, Fülöp F: Syntheses and conformational analyses of new naphth[1,2-*e*][1,3]oxazino[3,2-*c*]quinazolin-13-ones. *Tetrahedron*, 68: 4600-4608 (2012)
2. Csütörtöki R, Szatmári I, Heydenreich M, Koch A, Starke I, Fülöp F, Kleinpeter E: Novel piperidine-fused benzoxazino- and quinazolinonaphthoxazines—synthesis and conformational study. *Tetrahedron*, 68: 6284-6288 (2012)
3. Nonn M, Kiss L, Sillanpää R, Fülöp F: Synthesis of highly functionalized β -aminocyclopentanecarboxylate stereoisomers by reductive ring opening reaction of isoxazolines. *Beilstein J. Org. Chem.*, 8: 100-106 (2012)
4. Nonn M, Kiss L, Sillanpää R, Fülöp F: Selective nitrile oxide dipolar cycloaddition for the synthesis of highly functionalized β -aminocyclohexanecarboxylate stereoisomers. *Tetrahedron*, 68: 9942-9948 (2012)
5. Nonn M, Kiss L, Hänninen MM, Sillanpää R, Fülöp F: Synthesis of Highly Functionalized Fluorinated Cispentacin Derivatives. *Chem. Biodivers.*, 9: 2571-2581 (2012)
6. Kiss L, Nonn M, Fülöp F: Syntheses of Isoxazoline-Based Amino Acids by Cycloaddition of Nitrile Oxides and Their Conversion into Highly Functionalized Bioactive Amino Acid Derivatives. *Synthesis*, 44: 1951–1963 (2012)
7. Fülöp F, Szatmári I, Toldi J, Vécsei L: Modifications on the carboxylic function of kynurenic acid. *J. Neural Transm*, 119: 109-114 (2012)
8. Szöllősi Gy, Makra Zs, Fekete M, Fülöp F, Bartók M: Heterogeneous enantioselective hydrogenation in a continuous-flow fixed-bed reactor system: hydrogenation of activated ketones and their binary mixtures on Pt-Alumina-Cinchona alkaloid catalysts. *Catal. Letters*, 142: 889-894 (2012)
9. Balázsik K, Szöllősi Gy, Berkesi O, Szalontai G, Fülöp F, Bartók M: Heterogeneous asymmetric hydrogenation of *N*-heterocyclic compounds: hydrogenation of tetrahydroisoquinoline derivatives. *Top Catal*, 55: 880-888 (2012)
10. Makra Zs, Szöllősi Gy, Bartók M: Achiral amine additives in the enantioselective hydrogenation of aliphatic α,β -unsaturated acids over cinchonidine-modified Pd/Al₂O₃ catalyst. *Catal. Today*, 181: 56-61 (2012)

A fentiekén kívül egy szabadalmi bejelentés is történt:

Vécsei L, Zádori D, Klivényi P, Fülöp F, Szatmári I, Toldi J, Freund T, Nyíri G, Szőnyi A: Use of kynurenic acid amide derivatives for the treatment of Huntington's disease. *PCT Int. Appl.* (2012), WO 2012/001438 A1.

MTA–SZTE SZUPRAMOLEKULÁRIS ÉS NANOSZERKEZETŰ ANYAGOK KUTATÓCSOPORT

Dékány Imre, az MTA rendes tagja
6720 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.
telefon: (62) 544 210; fax: (62) 544 042
e-mail: i.dekany@chem.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2012-ben

Plazmonikus tulajdonságú, gömb és rúd alakú arany illetve ezüst nanorészecskék szabályozott szintézise. Az előállított nemesfém nanorészecskék felületi funkcionálizálása egyszerű aminosavakkal, kispeptidekkel illetve nagyobb fehérjékkel potenciális orvosi diagnosztikai felhasználásuk céljából. A kialakított nanométeres tartományba eső nano-biokonjugátumok fiziológiás körülmények közötti stabilitásának tanulmányozása, fluoreszcencia emissziós vizsgálatok. A biofunkcionálizált arany nanorészecskék modell membránokkal való kölcsönhatásának jellemzése Langmuir-mérlegen. Mag-héj szerkezetű fényporok előállítása. Felületi plazmon rezonancia (SPR) vizsgálatok kinurénsav és glutamát receptor kölcsönhatásának vizsgálatára. Kiszögű röntgenszórás (SAXS) mérések fehérjék szerkezetének vizsgálatára.

A β -amiloid (A β) 1-42 toxikus konformáció kialakulási körülményeinek tanulmányozása. Atomerő mikroszkópia, transzmissziós elektroszkópia és dinamikus fényszórás alkalmazása az A β 1-42 aggregáció mérése. Az A β 1-42 oligomerekhez kötődő fehérjék proteomikai azonosítása: az intracelluláris A β kölcsönhatása szubcelluláris sejtsejtszervecskével (endoplazmás reticulum). Az A β 1-42 kölcsönhatásai biológiai membránokkal.

II. A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Pazmonikus nemesfém nanorészecskék és fehérjék biokonjugátumainak jellemzése

Arany (Au), ezüst (Ag) illetve eltérő arányú arany/ezüst homogén ötvözeteket illetve mag-héj szerkezetű nanorészecskéket szintetizáltak, amelyek méretét transzmissziós elektronmikroszkóppal határozták meg. Az optikai tulajdonságok jellemzésére UV-Vis abszorbanca spektrumokat határoztak meg, amelyeket FEM számolásokkal modelleztek. Au nanorészecskéket szintetizáltak vizes közegben, majd különböző aminosavakat, fehérjéket (triptofán, fenilalanin, BSA, lizozim) kapcsoltak a részecskék felszínére. Az Au nanodiszperziók fluoreszcenciás vizsgálatánál megfigyelték, hogy a nemesfém és a fehérjék (lizozim, BSA) között plazmonikus kapcsolat jön létre: mind az emissziós mind a gerjesztési színeképek jellegzetes változásokat mutattak. Kiszögű röntgenszórás módszerrel (SAXS) tanulmányozták Au-fehérje és fehérje-tenzid biokonjugátumok szerkezeti jellemzőit, amelyek alapján az alakjukra, konformációjukra vonatkozóan vontak le következtetéseket. Polielektrolitok (PSS és Chitosan) felhasználásával többhéjú, albumin maggal rendelkező mag-héj kompozitokat állítottak elő, amelyek gyógyszerhatóanyagok hordozására és szabályozott hatóanyag leadásra alkalmazhatók. Az Au nanorészecskék élő sejtfalakkal való kölcsönhatásának modellezésére Langmuir-mérlegen végeztek modell kísérleteket, amelyek a részecskék orvosi biológiai alkalmazásai szempontjából fontosak. Vizsgálataikkal kimutatták a részecskék méretének és a felületükre kapcsolt aminosavak meghatározó szerepét a membránfalba történő beépülés során.

β -Amiloid (A β) peptidek tanulmányozása

Új, gyors és megbízható módszert dolgoztak ki A β 1-42 toxikus hatásának tanulmányozására patkány hippocampusz szeletekben (Mózes et al. Brain Res. Bull. 2012). Egy kísérletsorozatban tanulmányozták az A β 1-42 toxikus formáinak kialakulását: milyen körülmények esetén alakul ki toxikus konformáció és aggregáció? Vizsgálataik szerint pH=11,0 értéken 60 percig végzett kezelés felgyorsítja a toxikus konformáció kialakulását, amely valószínűleg a lúgos pH-n lejátszódó részleges racemizáció–epimerizáció és izopeptid kötések kialakulásának következménye. Az aggregáció folyamata jól nyomon követhető (atomerő-mikroszkópia, transzmissziós elektronmikroszkópia, dinamikus fényszóródás), de ezek a módszerek nem árulják el a toxikus konformáció jellegét. A legkülönbözőbb aggregációs állapotú A β 1-42 formák mutatnak toxicitást az alkalmazott biológiai rendszerekben.

Az A β 1-42 oligomerekhez kötődő fehérjék proteomikai azonosítása

Folytatták az előző évben elkezdett rendszerbiológiai vizsgálatokat (Juhász et al. Neurochem. Int. 2011). Az intracelluláris A β 1-42 kiválthatja az endoplazmás retikulum stresszt (ER-stressz), ennek egyik következménye a Ca²⁺-homeosztázis zavara, a mitokondriumok aktiválódása. Proteomikai vizsgálataik bizonyították, hogy nagyszámú fehérje expressziója megváltozik az ER-stressz hatására (Földi et al. Neurochem. Int. 62 (2013) 58–69). Kísérleteik szerint ER-stressz után egy nagy csoport mitokondriális fehérje upregációt mutat (az ATP-termeléssel, a trikarbonsav-ciklussal és más mitokondriális anyagcsere folyamattal összefüggő fehérjék). Az ER-stressz következménye az UPR („unfolded protein response”) és a túlaktiválás után a mitokondriumok kollapszusa, ami az idegsejtek halálához vezet.

Az A β 1-42 kölcsönhatásai biológiai membránokkal

Megvizsgálták, hogy milyen biológiai membránokkal léphet kölcsönhatásba az A β 1-42 (Penke et al. Electrophoresis 2012). Az idegsejtek közötti intersticiális állományban lévő A β kölcsönhatásba lép a sejtek plazmamembránjával és endocitózissal bejut a sejtbe. A sejtben belüli (intraneuronális) A β a legkülönbözőbb sejtsejtszervecskék membránjával lép kölcsönhatásba (endoplazmás retikulum, endoszómák, lizoszómák, mitokondriumok, stb.) és ezen túl a citoplazma fehérjékkel, a riboszómákkal és a mikrotubuláris rendszer fehérjéivel.

Önszerveződő rendszerek számítógépes vizsgálata

Purin származékok önszerveződő rendszerét vizsgálták kvantumkémiai módszerek segítségével. Ennek keretében megállapították, hogy a 3-metilxantin szalag-szerű struktúrák kialakítására képes síkfelületen, amit más kutatások kísérletileg is igazoltak. A 7-metilguanin számítógépes vizsgálata során egyrészt szalag-szerű struktúrák kialakulását valószínűsítették, másrészt felvetették anion kötő ciklikus hexamerek lehetőségét.

b) Tudomány és társadalom

Előadásokat tartottak (SZAB székház, Szeged) a nanoszerkezetű anyagok tulajdonságairól és gyakorlati alkalmazásáról. Megismertették a bioszenzorok működését és azok gyakorlati alkalmazását a környezetvédelemben és az orvosi diagnosztikában. „Nanomedicina” címmel egy szemeszteres előadás kurzust tartottak orvos, gyógyszerész és informatikus hallgatóknak. Előadásokat tartottak az öregedés és a demencia kapcsolatáról, az öregedés biológiájáról Aradon (2012. szeptember 28.). Egyetemi hallgatóknak tartottak előadássorozatot az Alzheimer kórrol.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2012-ben

Faculty of Non-Ferrous Metals, AGH University of Science and Technology, Krakko, Lengyelország – Arany nanorészecskék szintézise.

SZTE FOK Fogpótlástani és Orális Biológiai Tanszék – Titán implantátumok bevonása antimikrobiális nanohibrid filmekkel.

SZTE ÁOK Szülészeti és Nőgyógyászati Klinika – pH szenzitív hidrogélek szintézise és feltöltése nanokapszulázott hatóanyagokkal.

SZTE ÁOK Orvosi Mikrobiológiai és Immunbiológiai Intézet – Antimikrobiális hatású nanokapszulák és nanohibrid filmek.

Biotalentum Kft., Gödöllő – Óssejtek alkalmazása az Alzheimer-kór kutatásában.

VU University Amsterdam, Department of Theoretical Chemistry – Önszerveződő rendszerek vizsgálata.

IV. A 2012-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hungary-Serbia „DEVTEGEN” Development of innovative technology’s for prevention and treatment of female genitale infections, HUSRB/1002/214/078,, 2012–2013., 11,6M Ft 7th Framework programme of the EU, Industry – Academia Partnership and Pathways (IAPP): „Patient – specific stem cell derived models for Alzheimer’s disease and related neurodegenerative disorders”, PIAPP-GA-2012-324451 (STEMMAD), 60.000 EURO.

V. A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Hornok V, Bujdosó T, Toldi J, Nagy K, Demeter I, Fazakas C, Krizbai I, Vécsei L, Dékány I: Preparation and properties of nanoscale containers for biomedical application in drug delivery: preliminary studies with kynurenic acid. *Journal of Neural Transmission*, 119:(2) 115-121 (2012)
2. Csapó E, Patakfalvi R, Hornok V, Tóth L T, Sipos Á, Szalai A, Csete M, Dékány I: Effect of pH on stability and plasmonic properties of cysteine-functionalized silver nanoparticle dispersion. *Colloids and Surfaces B-Biointerfaces*, 98: 43-49 (2012)
3. Ábrahám N, Dékány I: Enhanced photoluminescence of ZnO Langmuir-Blodgett films on gold coated substrates by plasmonic coupling. *Journal of Physical Chemistry C - Nanomaterials and Interfaces*, 116:(29) 15667-15674 (2012)
4. Mozes E, Hunya A, Posa A, Penke B, Datki Z: A novel method for the rapid determination of beta-amyloid toxicity on acute hippocampal slices using MTT and LDH assays. *Brain Res Bull*, 87: (6) 521-525 (2012)
5. Penke B, Toth AM, Foldi I, Szucs M, Janaky T: Intraneuronal ss-amyloid and its interactions with proteins and subcellular organelles. *Electrophoresis*, 33: (24) 3608-3616 (2012)
6. Paragi G, Szolomájer J, Kupihár Z, Batta Gy, Kele Z, Pádár P, Penke B, Zijlstra H, Fonseca Guerra C, Bickelhaupt F M, Kovács L: Guanine, xanthine and uric acid assemblies: comparative theoretical and experimental studies, In: L. Spindler, W. Fritzsche, Guanine quartets: structure and application, Cambridge: Royal Society of Chemistry: 179-193 (2012)

**A MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI TÁMOGATOTT
KUTATÓCSOPORTOK**

FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI ADATAI 2012-BEN

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	5,5	Ebből kutató ² :	5,5
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 :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	12
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	12
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	3
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	3
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	2
Könyv, atlasz	magyarul: 0 idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0 idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	2,89	Összes független hivatkozás száma (2011):	46
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			56

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	9
	poszterek száma: 0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0	

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	6
Témavezetések száma: TDK munka: 11	Diplomamunka (BSc): 17
Diplomamunka (MSc): 9	PhD: 4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	20 400	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 1	Teljes saját bevétel: 9000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	4	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	7000	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	1000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1000	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–BME Irányítástechnikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

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

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			46
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			44
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			4
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	8,15	Összes független hivatkozás száma (2011):	37
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			45

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		43
	poszterek száma:	1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 26	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :		2
Témavezetések száma: TDK munka: 5	Diplomamunka (BSc):	11
Diplomamunka (MSc): 2	PhD:	12

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	19 100	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 0	Teljes saját bevétel:	0 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0 E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	7,73	Ebből kutató ² :	7,73
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma ⁴ :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	17
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	17
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	17
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	17
Könyv, atlasz	magyarul: 0 idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0 idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	98,02	Összes független hivatkozás száma (2011):	282
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			329

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	1	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ : 0
--	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	13
	poszterek száma: 5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0	

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	11
Témavezetések száma: TDK munka: 5	Diplomamunka (BSc): 5
Diplomamunka (MSc): 10	PhD: 13

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	40 000	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 0	Teljes saját bevétel: 177 900	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	6	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	23 800	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	48 100	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:	3	
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	106 000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	6,18	Ebből kutató ² :	6,18
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	2
		Rendes tag és levelező tag:	2
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, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	19	
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	19	
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0	
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	1	
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	17	
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	15	
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven: 1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	58,52	Összes független hivatkozás száma (2011):	509
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			616

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	0	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ : 0
--	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	10
	poszterek száma: 5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 1	

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	8
Témavezetések száma: TDK munka: 4	Diplomamunka (BSc): 7
Diplomamunka (MSc): 5	PhD: 8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	26 200	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 0	Teljes saját bevétel: 125 100	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	5	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	11 200	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:	3	
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	99 900	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	12 000	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	2000	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	6,42	Ebből kutató ² :	6,42
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 :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	17
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	17
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	4
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	5
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	5
Könyv, atlasz	magyarul: 0
	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0
	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	9,72	Összes független hivatkozás száma (2011):	134
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			212

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	1	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	4		
	poszterek száma:	6	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSOÓKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	8		
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	3

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	23 500	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	15 200	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			2500	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			500	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :			0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			12 800	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–BME Sztochasztika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	5,21	Ebből kutató ² :	5,0
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 :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			6
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			6
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			5
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	7,24	Összes független hivatkozás száma (2011):	25
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			35

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		11
	poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :		5
Témavezetések száma: TDK munka: 0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc): 6	PhD:	5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	24 600	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 0	Teljes saját bevétel:	0 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0 E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0 E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :		0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0 E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	6,5	Ebből kutató ² :	6,5
PhD, kandidátus:	3	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 :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			8
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			2
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			3
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			4
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	10,03	Összes független hivatkozás száma (2011):	13
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			13

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		0
	posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

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

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	30 800	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 0	Teljes saját bevétel:	0 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0 E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–DE Homogén Katalízis Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	7,0	Ebből kutató ² :	6,0
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 :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	1
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	1
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	0
Könyv, atlasz	magyarul: 0 idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0 idegen nyelven: 1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	0,0	Összes független hivatkozás száma (2011):	219
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			255

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ : 0
--	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	7
poszterek száma:	9
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0	

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	6
Témavezetések száma: TDK munka: 1	Diplomamunka (BSc): 3
Diplomamunka (MSc): 1	PhD: 4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	27 100	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 0	Teljes saját bevétel:	19 000 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0 E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	7000	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	12 000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–DE Részecskefizikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	3,5	Ebből kutató ² :	3,5
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 :			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			9
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			7
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			7
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			7
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	27,52	Összes független hivatkozás száma (2011):	0
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			0

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	1	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			6
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	25 000	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	49 300	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1	
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	7200	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0	
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			3	
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	34600	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1	
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	7500	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	7,5	Ebből kutató ² :	7,0
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 :			1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			13
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			13
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			12
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			12
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	42,73	Összes független hivatkozás száma (2011):	317
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			428

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			3
		poszterek száma:	1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	2		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			9
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	14

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	45 000	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	36 000 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	36 000 E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	4,0	Ebből kutató ² :	4,0
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
		Rendes tag és levelező tag:	1
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, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			8
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			8
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	28,88	Összes független hivatkozás száma (2011):	136
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			195

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			7
		poszterek száma:	9
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	0

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	26 200	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	50 500 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	35 900 E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	14 600 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA-ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	7,5	Ebből kutató ² :	7,5
PhD, kandidátus:	5	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 :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	16	
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	15	
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	3	
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	1	
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	9	
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	7	
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven: 2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	13,77	Összes független hivatkozás száma (2011):	132
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			172

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	1	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	11
	poszterek száma: 13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0	

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	8
Témavezetések száma: TDK munka: 2	Diplomamunka (BSc): 5
Diplomamunka (MSc): 4	PhD: 5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	35 000	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 1	Teljes saját bevétel: 7000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	6400	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	600	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	3,0	Ebből kutató ² :	3,0
PhD, kandidátus:	1	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 :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	15
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	15
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	2
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	10
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	10
Könyv, atlasz	magyarul: 0 idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0 idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	5,9	Összes független hivatkozás száma (2011):	54
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			64

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	10
	poszterek száma: 0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0	

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	3
Témavezetések száma: TDK munka: 2	Diplomamunka (BSc): 5
Diplomamunka (MSc): 5	PhD: 3

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	20 000	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 1	Teljes saját bevétel: 16 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	16 000	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség: 10,0	Ebből kutató ² :	8,0
PhD, kandidátus: 7	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 :		4

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :		18
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :		17
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:		0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:		0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:		15
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció		15
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven: 1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ : 42,56	Összes független hivatkozás száma (2011):	227
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :		321

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora: 0
---	--------	----------------

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		13
poszterek száma:		21
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 2		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :		7
Témavezetések száma: TDK munka: 3	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc): 7	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		34 000	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 0	Teljes saját bevétel:	14 800	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		8	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		14 000	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		400	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :		400	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	7,0	Ebből kutató ² :	6,0
PhD, kandidátus:	6	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 :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	11
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	10
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	7
Könyv, atlasz	magyarul: 0 idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0 idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	41,03	Összes független hivatkozás száma (2011):	551
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			574

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	0	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ : 0
--	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	7
	poszterek száma: 3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0	

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	6
Témavezetések száma: TDK munka: 0	Diplomamunka (BSc): 0
Diplomamunka (MSc): 7	PhD: 8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	40 000	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 0	Teljes saját bevétel:	91 600 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		5
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	15 600	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		2
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	76 000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–ME Anyagtudományi Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	12,4	Ebből kutató ² :	9,0
PhD, kandidátus:	7	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, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :		26
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :		26
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:		9
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:		0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:		3
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció		2
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	2,5	Összes független hivatkozás száma (2011):	44
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			50

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	0	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		10	
	poszterek száma:	5	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :		13	
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	35 000	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	24 000 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		0	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		1	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	24 000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0	
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–MTM–ELTE Paleontológiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	8,1	Ebből kutató ² :	5,6
PhD, kandidátus:	3	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 :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			26
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			25
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			2
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			16
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			16
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 4	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	35,59	Összes független hivatkozás száma (2011):	137
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			188

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			10
		poszterek száma:	4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	6	PhD:	5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	22 300	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	26 600 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	26 600 E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–PE Levegőkémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	7,0	Ebből kutató ² :	6,0
PhD, kandidátus:	3	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

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :		10
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :		6
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:		0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:		0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:		6
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció		5
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	17,86	Összes független hivatkozás száma (2011):	417
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			527

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	0	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		3	
	poszterek száma:	6	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :		6	
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	7

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	33 900	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	48 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		1		
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	7300	E Ft	
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0		
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		4		
	A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	40 700	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0		
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft	

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	4,5	Ebből kutató ² :	4,5
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 :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			12
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			12
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			9
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			9
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	6,68	Összes független hivatkozás száma (2011):	79
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			81

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			15
		poszterek száma:	1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	0

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	21 700	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	
		0	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
			E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
			E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0
			E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
			E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0
			E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	4,5	Ebből kutató ² :	4,0
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
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			7
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			7
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			6
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			6
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	31,55	Összes független hivatkozás száma (2011):	199
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			255
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			10
		poszterek száma:	11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	2		
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		19 300	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	57 000 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	21 000 E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	36 000 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám ¹ :	10,5	Ebből kutató ² :	9,5
PhD, kandidátus:	8	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, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			30
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			29
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			2
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			4
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	4,44	Összes független hivatkozás száma (2011):	304
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			352

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	1	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			10
		poszterek száma:	11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	5	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		31 700	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	0 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0 E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	5,0	Ebből kutató ² :	4,25
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, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			22
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			22
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			22
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			22
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	59,65	Összes független hivatkozás száma (2011):	348
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			483

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			0
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

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

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	25 900	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ :	0	Teljes saját bevétel:	
		0	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
			E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
			E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	0
			E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0
			E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0
			E Ft

Főbb mutatók 2012-ben

MTA–SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	10,0	Ebből kutató ² :	9,0
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 :			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	24
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	23
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	2
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	17
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	17
Könyv, atlasz	magyarul: 0 idegen nyelven: 0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0 idegen nyelven: 3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	46,25	Összes független hivatkozás száma (2011):	743
Összes hivatkozás száma (2011) ⁸ :			818

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2012-BEN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	1	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0	külföldi oltalmak száma ¹¹ : 0
--	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	6
	poszterek száma: 23
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ : 0	

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	8
Témavezetések száma: TDK munka: 1	Diplomamunka (BSc): 1
Diplomamunka (MSc): 0	PhD: 5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	28 600	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma ¹⁶ : 1	Teljes saját bevétel: 223 200	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4000	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	131 600	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:		5
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	87 600	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

**MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI
LENDÜLET-KUTATÓCSOPORTOK**

MTA–ATOMKI LENDÜLET RÁCS KVANTUM-SZÍNDINAMIKA KUTATÓCSOPORT

MTA ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET
4026 Debrecen, Bem tér 18/c
telefon: (52) 509 200/11322; e-mail:kgt@atomki.mta.hu
Kutatócsoport-vezető: Kovács Tamás György

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport a kvarkokat protonokká és neutronokká összetartó erős kölcsönhatás elméletét, a kvantum-színdinamikát vizsgálja, részben számítógépes eszközökkel. Ehhez ebben az évben a Lendület program segítségével beszereztek egy 18 gépből álló számítógépklasztert, amely 36 darab nagy teljesítményű Nvidia grafikus kártyát is tartalmaz. A klasztert a továbbiakban bővíteni is tervezik.

Az erős kölcsönhatást a hétköznapi életben nem észleljük közvetlenül. Közvetett jelentőségét azonban mutatja, hogy a körülöttünk lévő anyag tömegének 99%-át a kvarkok közötti erős kölcsönhatásban tárolt energia adja. (A nemrégiben felfedezett Higgs bozon csak a maradék 1%-ért felelős.)

Kutatásukban azt vizsgálják, hogyan viselkednek a kvarkok a nehézion ütköztetőkből zajló kísérletekben, ahol nagyon magas hőmérsékletű anyag, úgy nevezett kvark-gluon plazma jön létre. Eddigi legfontosabb eredményük, hogy a plazmában a kvarkok egy része nem a megszokott kiterjedt, hullámszerű állapotban, hanem térben lokalizált állapotban van. Ez ahhoz hasonló, mint amikor egy elektromos szigetelőben a helyhez kötött elektronok nem képesek elektromos áramot továbbítani.

A továbbiakban a kutatók szeretnék jobban megérteni ezeknek a lokalizált kvark állapotoknak a következményeit. Ez hozzásegíthet a plazma további érdekes tulajdonságainak felfedezéséhez és a számítógépes módszerek hatékonyságának javításához, valamint szilárdtest-fizikai alkalmazásokhoz is elvezethet. A csoport szoros együttműködésben dolgozik a Regensburgi Egyetemen Falk Bruckmann-csoportjával és napi kapcsolatban áll az ELTE Rács-térelmélet Lendület-kutatócsoportjával is.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. F. Bruckmann, T.G. Kovacs and S. Schierenberg, „Anderson localization through Polyakov loops: lattice evidence and Random matrix model”, Phys. Rev. D84 (2011) 034505 [arXiv:1105.5336 [hep-lat]].
2. T.G. Kovacs and F. Pittler, „Poisson-Random Matrix Transition in the QCD Dirac Spectrum”, Phys.Rev. D86 (2012) 114515; arXiv:1208.3475 [hep-lat].
3. T.G. Kovacs and F. Pittler, „Poisson statistics in the high temperature QCD Dirac spectrum”, PoS Lattice2011 (2011) 213 [arXiv:1111.3524 [hep-lat]].
4. T.G. Kovacs, F. Pittler, F. Bruckmann and S. Schierenberg, „High temperature quark localization by Polyakov loops”, PoS Lattice2011 (2011) 200 [arXiv:1112.0119 [hep-lat]].
5. T.G. Kovacs and F. Pittler, „Is there a gap in the QCD Dirac spectrum above $T(c)$?”, PoS Lattice 2012 (2012) 078.

MTA–CSFK LENDÜLET EXOBOLYGÓK ÉS CSILLAGSZERKEZET KUTATÓCSOPORT

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet
1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 15-17.
telefon: (1) 391 9324; e-mail: kiss@konkoly.hu
Kutatócsoport-vezető: Kiss L. László

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézetében 2009 októbere óta működő Lendület-kutatócsoport tudományos munkája 2012 során a hazai teleszkópokkal, külföldi nagytávcsövekkel és űrobszervatóriumokkal gyűjtött csillagászati megfigyelések feldolgozására, illetve számítógépes modellezésre alapult. A 20 referált szakkikben közölt eredmények kiterjednek a Naprendszer peremén található jeges égitestek vizsgálatára, a más csillagok körül keringő bolygókat kísérő holdak (ún. exoholdak) kimutatásai módszereinek kidolgozására, illetve a Kepler-űrtávcső minden korábbinál pontosabb fényességmérésein alapuló vizsgálatokra a csillagok belső szerkezetének tanulmányozására. Az Európai Déli Obszervatórium 8,2 m-es VLT teleszkópjával, illetve a Herschel és Hubble űrtávcsövekkel kimutattuk, hogy a Naptól már a Neptunusztól is távolabb járó Hale-Bopp-üstökös aktivitásának végén dérképződéshez hasonló folyamat zajlott az üstökös magon. A felismerés jelentőségét az extraszoláris üstökösök detektálhatósága adja, mert a Hale-Bopp az egyetlen közeli példány a korai naprendszerekben nagy számban feltételezett óriás kométákból (50-100 km-es maggal bíró jeges égitestek). A kutatók folytatták a triplán fedő hármascillag HD 181068 vizsgálatait a Kepler adatai alapján, és komplex dinamikai elemzéssel pontos tömegeket határoztak meg mindhárom csillagra. A bonyolult fedési fénygörbe modellezésére új módszert dolgoztak ki, amivel abszolút csillagsugarakat és teljes, háromdimenziós pályákat számítottak ki. A rendszerben található vörös óriás rezgéseit árapály-hatásokkal magyarázták meg, amihez új elmélet alapjait fektették le a szoros hármascillagok dinamikai fejlődésére. A szombathelyi ELTE Gothard Asztrofizikai Obszervatóriummal közös kutatócsoportot alapítottak, amelynek első fontos eredménye az exobolygókra is érzékeny optikai spektroszkópia hazai meghonosítása. 2012 végén csatlakoztak a svájci vezetésű CHEOPS exobolygó-kutató űrtávcső konzorciumához, amelynek célja egy fényes csillagok körül Föld-méretű exobolygók kimutatására képes űrteleszkóp megépítése és pályára állítása 2017-ig. A magyar vállalás a tudományos hasznosítás mellett kiterjed az űrtávcső működéséhez szükséges szoftver- és hardverfejlesztésre is, szoros együttműködésben hazai űripari cégekkel.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Derekas A, Szabó GyM, Berdnikov L, Szabó R, Smolec R, Kiss LL, Szabados L, Chadid M, Evans NR, Kinemuchi K, Nemec JM, Seader SE, Smith JC, Tenenbaum P: Period and light-curve fluctuations of the Kepler Cepheid V1154 Cygni. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 425: 1312 (2012)
2. Szabó GyM, Pál A, Derekas A, Simon AE, Szalai T, Kiss LL: Spin-orbit resonance, transit duration variation and possible secular perturbations in KOI-13. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 421: L122 (2012)

3. Szabó GyM, Kiss LL, Pál A, Kiss Cs, Sárneczky K, Juhász A, Hogerheijde MR: Evidence for Fresh Frost Layer on the Bare Nucleus of Comet Hale-Bopp at 32 AU Distance. *Astrophysical Journal*, 761: id. 8 (2012)

A kutatócsoport 2012-ben 20 impakt faktoros cikket (kumulatív i.f. 104.1), 17 konferencia-kiadványt és 30 tudományos ismeretterjesztő cikket jelentetett meg.

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Végtelen titokmegosztások

2012-ben sikeresen folytatták a kriptográfiában egyik fontos primitív, a titokmegosztás kutatását. Korábbi eredményeikre támaszkodva vizsgálták a titokmegosztás folytonos változatát. Itt a véges diszkrét valószínűségi tereket általános valószínűségi terek helyettesítik. Meglepő új eredményeik közül mindjárt az első rámutatott a mérhetőség fontosságára: annak a függvénynek, ami a titokrészekből állítja elő a titkot, mérhetőnek kell lennie, egyébként paradox rendszerek építhetők. A szokásos Shamir-féle titokmegosztást nem lehet a végtelen esetre általánosítani, mivel nem létezik egyenletes eloszlás végtelen testeken. Gauss folyamatokat használva azonban sikerült újfajta konstrukciókat adniuk. Meglepő módon nem minden lehetséges elérési struktúrához létezik (közelítőleg) tökéletes titokmegosztás. Topológiai jellemzőket felhasználva, sikerült mindazokat a struktúrákat jellemezniük, amelyek ilyenek. Az általános konstrukciók elvezettek a span programok Hilbert terekre vonatkozó általánosításaihoz. Ezek az objektumok a kvantum számítások elméletében is fontos szerepet játszhatnak.

Szimultán titokmegosztások

A szimultán titokmegosztásról kapott eredményeiket a CECC'12 konferencián ismertették: itt egyszerre több titok különböző elérési struktúrák melletti szétosztásánál vizsgálták meg, mennyit lehet nyerni azzal szemben, ha minden titkot külön-külön osztanak szét. A probléma megközelítésének újdonsága, hogy a rendszer biztonságának akkor is meg kell maradnia, ha egy vagy több titkot a résztvevők egyszer (vagy akár többször is) visszaállítanak; az ilyen típusú vizsgálatok az irodalomban teljesen újak. Fontos eredményeket értek el az entrópia függvény tulajdonságainak vizsgálatában is. Az eddigi legteljesebb egyenlőtlenség lista helyességét (Dougherty et al.) a szerzőktől függetlenül ellenőrizték, és további biztató eredményeket értek el, melyekkel várhatóan az eddigi sporadikus eredmények legalább egy részére strukturális jellemzéseket tudnak adni. Korábbi fontos eredményeik, úgymint az online titokmegosztás, valamint a fa alapú titokmegosztások pontos korlátja, 2012-ben jelentek meg.

Pszudovéletlen sorozatok

Pszudovéletlen sorozatok a kriptográfia egyik legalapvetőbb építőkövei. A gyakorlatban előszeretettel használnak lineáris rekurziókat sorozatok generálására, azok hatékony implementálhatósága miatt. A népszerű használat miatt elengedhetetlen, hogy minél több információval rendelkezünk ezen sorozatok pszeudovéletlenségéről. Az elmúlt időszakban sikerül bizonyítani, hogy természetes feltételek mellett a hosszú rekurzióval generált sorozatokból származtatott bináris sorozatok erős pszeudovéletlen tulajdonsággal rendelkeznek. Szintén sikerült bizonyítani, hogy a rövid rekurzív sorozatokból származtatott bináris sorozatok gyenge pszeudovéletlenségi tulajdonsággal rendelkeznek.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. M. Bárász, P. Ligeti, L. Mérai, D. A. Nagy, Anonymous sealed bid auction protocol based on a variant of the Dining Cryptographers' Protocol, *Periodica Mathematica Hungarica*, 65 (2) (2012) 167-176.
2. P. Camassa, R. Longo, Y. Tanimoto and M. Weiner, Thermal states in conformal QFT, I. *Commun. Math. Phys.* 309 (2012), 703–735.
3. P. Camassa, R. Longo, Y. Tanimoto and M. Weiner, Thermal states in conformal QFT, II. *Commun. Math. Phys.* 315 (2012) 771–802.
4. L. Csirmaz, G. Tardos, On-line secret sharing, *Designs, Codes and Cryptography* 63 (2012), 127–147.
5. P.L. Erdős, D. Gerbner, D. Mubayi, N. Lemons, B. Patkós, C. Palmer, Two-part set systems, *Electronic Journal of Combinatorics* 19 (2012)
6. D. Gerbner, B. Keszegh, Path-search in a pyramid and in other graphs, *Journal of Statistical Theory and Practice* 6 (2), (2012), 303–314.
7. D. Gerbner, B. Keszegh, C. Palmer, Generalizations of the Tree Packing Conjecture, *Discussiones Mathematicae Graph Theory* 32 (2012) 569–583.
8. D. Gerbner, N. Lemons, C. Palmer, B. Patkós, V. Szécsi, Cross-Sperner families, *Studia Sci. Math. Hungarica* 49 (2012) 44–51.
9. G. O.H. Katona, K. Tichler, Encoding Databases Satisfying a Given Set of Dependencies, *Foundations of Information and Knowledge Systems, LNCS 7153* (2012) 203-223.
10. J. Körner, S. Messuti, G. Simonyi, Families of graph-different Hamilton paths, in: *SIAM J. Discrete Math.*, 26 (2012), 321–329.
11. L. Mérai, Construction of pseudorandom binary sequences over elliptic curves using multiplicative characters, *Publ. Math. Debrecen*, 80 (2012) no. 1-2, 199–213.
12. L. Mérai, Remarks on pseudorandom binary sequences over elliptic curves, *Fund. Inform.* 114 (2012) no. 3-4, 301–308.

MTA-RÉNYI INTÉZET LENDÜLET ALACSONY DIMENZIÓS TOPOLOGIA KUTATÓCSOPORT

MTA RÉNYI MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET

1053 Budapest, Reáltanoda utca 13-15.

telefon: (1) 483 8320; e-mail: stipsicz@renyi.hu

Kutatócsoport-vezető: Stipsicz András

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Rácspont homológiák

A Némethi által 2008-ban bevezetett rácsponthomológia-elméletre talált egy redukciós tételt a kutatócsoport egyik tagja. A csoport vezetője (társszerzőkkel) kiterjesztette a homológia-elméletet bizonyos csomókra, és a kiterjesztés segítségével belátta sokaságok egy nagy családjára, hogy az eredmény megegyezik a sokaság Heegaard Floer homológiájával. Emellett egy spektrális sort is talált (ugyanazon munkatársak együttműködésével), mely a rácspont-homológiáról konvergál a sokaság Heegaard Floer homológiájára. Mivel a spektrális sor bizonyos esetekben összeomlik, ezekre a sokaságokra a két elmélet izomorfiját kapjuk. Egy másik eredmény pedig a sokaság Seiberg-Witten invariánsait köti össze (Erhart elmélet segítségével) alkalmasan választott tartományokban található rácspontok számával.

Kombinatorikus Heegaard Floer elmélet

A kutatócsoport-vezető két kollégájával folytatta Heegaard Floer csoportok kombinatorikus megadásának és a csoportok invariancia-tulajdonságainak belátását kereső kutatásait. Az elméletet kiterjesztették a \mathbf{Z} feletti homológiákra és csomókra (illetve láncokra), valamint megértették a spin-struktúrák kombinatorikus leírhatóságának egy módját.

Felület-singularitások

A csoport két munkatársa megjelentette kötetét (a rangos *Lecture Notes in Mathematics* sorozatban), melyben nem-izolált singularitások Milnor fibrumainak alapvető tulajdonságait kezdték el vizsgálni. Munkájuk úttörő a témában.

Szinguláris leképezések

Két cikkben vizsgálták 3- és 4-sokaságokon értelmezett szinguláris leképezések szinguláris halmazainak viselkedését. 3-dimenziós sokaságokra megadtak egy módszert, amely alkalmas ilyen függvény megkonstruálására, 4-dimenzióban pedig felhasználtak egy hasonló konstrukciót bizonyos sokaságok egzotikusságának belátására.

Magas dimenziós kontakt topológia

E. Murphy, Plamenevskaya és Niederkrücker közreműködésével a csoportvezető belátta, hogy egy általánosított túlcavart diszk (ún. Plastikstufe) komplementumában minden Legendre-csomó laza, amennyiben a dimenzió legalább 5. Az eredmény segítségével bizonyos flexibilitás bizonyítható olyan kontakt sokaságokra, melyek ilyen általánosított túlcavart diszket tartalmaznak.

Parabolikus nyalábok

Egyik munkatárs bizonyos komplex görbék feletti parabolikus nyalábok modulusterének alkalmas Zariski nyílt részén talált érdekes, és a további kutatásokban jól alkalmazható koordinátarendszereket.

Egyéb eredmények

A csoport (a témavezető által elnyert ERC Advanced Grant-nak köszönhetően) szeptembertől jelentősen bővült. A jórészt külföldről (Cambridge, London, New York) érkezett tagok, illetve meghívott vendégek pezsgő szemináriumi életet biztosítottak. Júliusban pedig a CAST európai network félidei *CAST Summer School and Conference* rendezvényére Budapesten került sor, mintegy 140 résztvevővel, a témavezető szervezése mellett. Az előadásokat videón rögzítették (és mindenki számára elérhetővé tették), és a későbbiekben kötetben jelentetik meg a Bolyai Society Mathematical Studies (BSMS) gondozásában.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. B. Kalmár, T. Terpai, *Characteristic classes and existence of singular maps*, Trans. Amer. Math. Soc. **364** (2012), 3751–3779.
2. A. Némethi, Á. Szilárd, *Milnor Fiber Boundary of a Non-Isolated Surface Singularity*, Lecture Notes in Mathematics **2037**, 2012.
3. D. Gay, A. Stipsicz, *On symplectic caps*, Perspectives in analysis, geometry, and topology, 199–212, Progr. Math., **296**, Birkhauser/Springer, New York, 2012.
4. B. Kalmár, A. Stipsicz, *Maps on 3-manifolds given by surgery*, Pacific J. Math, **257** (2012), 9–35.
5. D. Nash, A. Stipsicz, *Gluck twist on a certain family of 2-knots*, Michigan Math. J., **61** (2012), 703–713
6. P. Ozsváth, A. Stipsicz, Z. Szabó, *Combinatorial Heegaard Floer homology and nice Heegaard diagrams*, Advances in Mathematics, **231** (2012), 102–171.
7. A. Stipsicz, M. Bhupal, *Smoothings of singularities and symplectic topology*, konferencia kötet, Bolyai Math Studies, Springer, 2012.
8. Sz. Szabó, *Nahm transform and parabolic minimal Laplace transform*. Journal of Geometry and Physics **62** (2012), 2241–2258.

MTA–WIGNER FK LENDÜLET FÉLVEZETŐ NANOSZERKEZETEK KUTATÓCSOPORT

MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT
1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.
telefon: (1) 392 2222; e-mail: gali.adam@wigner.mta.hu
Kutatócsoport-vezető: Gali Ádám

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A jelenleg használatban lévő napelemek hatásfoka meglehetősen alacsony, mivel a magasabb energiával beérkező fotonok csupán egyetlen töltéshordozót (ún. elektronlyukpárt) hoznak létre a cellában, és a fényenergia nagy része nem alakul át elektromos árammá, hanem hőként távozik. A kutatócsoport azt vizsgálja, hogyan lehet megvalósítani a töltéshordozó többszörözését és így jelentősen növelni a napelemek hatásfokát. A kutatók szerint nanokristályokra épülő cellákkal ez a cél elérhető. Elméleti számításokkal sikerült bebizonyítani, hogy alapvető fizikai jelenségek pontosabb megértésével és a bennük rejlő lehetőségek kiaknázásával növelhető a napelemtáblák hatásfoka. Az a módszertani fejlesztés, amit a jelenség tisztázásában sikerült megvalósítani, valódi áttörésnek számít a területen. Számításaik megmutatták, hogy nemcsak a felhasznált nanokristály anyaga, hanem a fázisa és a felülete jellemzői is fontosak a teljesítmény növelésében.

A kutatócsoport a biológiai jelzőrendszerek (biomarkerek) tökéletesítéséhez is újszerű megoldásokat keres. A biomarkerek festékanyagok, az élő szervezetben alapvető funkciót betöltő molekulákhoz kapcsolva nyomon követhetők a biokémiai folyamatok lefolyása során. A napjainkban használt jelzőmolekulák legnagyobb hátránya, hogy egy idő után önmaguktól felbomlanak, és ezért gyakran mérgezik a környezetüket. A kutatócsoport célja olyan nanorészecskék létrehozása, amelyeket élő szervezetekben is biztonsággal fel lehet használni. Együttműködve az MTA Enzimológiai Intézet igazgatójának, *Buday Lászlónak* Lendület kutatócsoportjával, a kutatók maguk igyekeznek ilyen kristályokat előállítani és kísérleti körülmények között tesztelni működésüket. Az eredményeik lehetővé tehetik orvosi alkalmazásukat, súlyos betegségek, például a rák fejlődésének nyomon követését, illetve célzott kezelését. Jelenleg olyan apró nanokristályok szabályozott előállításán dolgoznak, amelyek az agykéreg idegsejtjeinek ioncsatornáihoz is kapcsolódni tudnak. Az ioncsatornákon átfolyó mikroáram hatására ezek a jelzőrendszerek fényt bocsátanak ki. Valódi áttörést jelentene az agykutatás módszertanában, ha ez speciális mikroszkóppal valós időben megfigyelhető lenne, és sikerülne pontosan meghatározni, mely agykérgi területek aktívak adott feladatok elvégzése közben. A kutatócsoport vezetője *Rózsa Balázs* (MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézet) csoportjával együttműködve indította el kutatását, amelyben a KOKI speciális mikroszkópjával valós körülmények között tesztelik a fenti elképzelést.

Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont fizikusa társszerzője egy nemrég a *Nature Photonics* folyóiratban megjelent tanulmánynak, amely egy lépéssel közelebb viheti a kutatókat az ún. kvantumszámítógépek elkészítéséhez. A kvantumszámítógépek segítségével olyan feladatokat is meg tudnánk oldani, amelyeket a jelenlegi informatikai eszközökkel lehetetlen. A kvantumszámítógépek működése a kvantumbitek vezérlésén alapul, de fizikai megvalósítása rendkívül nehéz feladat. Az Oszakai Egyetem kutatói olyan gyémántkristályt állítottak elő, amelyből félvezető diódát tudtak készíteni. Ezenkívül egy speciális színcentrumot, ún. nitrogénvakancia-komplexumot is sikerült bennük létrehozni, amelyet képesek voltak kvantumbitként használni. A kísérlet bebizonyította, hogy elméletileg megvalósítható egy

olyan kvantumoptikai elvekre épülő számítógép, amelyet hagyományos társaihoz hasonlóan elektromos árammal működtethetünk. A kutatócsoport vezetője megmutatta, hogy valóban az áram hatására történik a kristályból fénykibocsátás, nem valamilyen más jelenség következtében. A frissen megjelent cikkről már recenzió jelent meg a *physicsworld.com* weboldalon és a *Nature News* rovatban. A szilárdtest kvantumbitek megvalósításában még egy eredményt érdemes kiemelni: a csoportvezető kutató számítási alapján az adalékolt szilícium nanohuzalok különleges tulajdonságai egyedülálló lehetőséget jelentenek, amelyet a neves *Nano Letters* folyóiratban közöltek.

A 2011-es *Lendület*-pályázaton nyertes *Domokos Péter* fizikussal közösen kvantumoptikai konferenciát szerveznek, amelyet 2013 májusában az MTA székházában rendeznek meg. Igyekeznek a tudományterület legjobbjait Magyarországra csábítani. Eddig már több, világszerte ismert, a *Nature* és a *Science* folyóiratban rendszeresen publikáló kutató fogadta el meghívásukat.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Enhancement of electron-nuclear hyperfine interaction at lattice defects in semiconducting single-walled carbon nanotubes studied by ab initio density functional theory calculations *V. Zólyomi, V. Ivádi and Adam Gali* *Physical Review B* 86 235433 (2012).
2. Near-infrared luminescent cubic silicon carbide nanocrystals for in vivo biomarker applications: an ab initio study *B. Somogyi, V. Zólyomi, and Adam Gali* *Nanoscale* 4 7720-7726 (2012).
3. Electronic and Optical Properties of Silicon Carbide Nanotubes and Nanoparticles Studied by Density Functional Theory Calculations: Effect of Doping and Environment *Márton Vörös and Adam Gali* *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* 9 1906-1940 (2012)
4. Electron paramagnetic resonance and theoretical studies of Nb in 4H- and 6H-SiC *Nguyen Tien Son, Xuan Thang Trinh, Andreas Gällström, Stefano Leone, Olof Kordina, Erik Janzén, Krisztián Szász, Viktor Ivády, and Adam Gali* *Journal of Applied Physics* 112 083711 (2012).
5. Silicon carbide quantum dots for bioimaging *David Beke, Zsolt Szekrényes, Denes Pálfi, Gergely Róna, István Balogh, Pal Andor Maák, Gergely Katona, Zsolt Czigány, Katalin Kamarás, Balazs Rózsa, Laszlo Buday, Beáta Vértessy and Adam Gali* *Journal of Materials Research* on-line pp. 1-5 (2012). DOI: 10.1557/jmr.2012.296
6. Preparation of small silicon carbide quantum dots by wet chemical etching *David Beke, Zsolt Szekrényes, István Balogh, Zsolt Czigány, Katalin Kamarás and Adam Gali* *Journal of Materials Research* on-line pp. 1-6 (2012). DOI: 10.1557/jmr.2012.223
7. Ab Initio Study of Phosphorus Donors Acting as Quantum Bits in Silicon Nanowires *Binghai Yan, Riccardo Rurali, and Ádám Gali* *Nano Letters* 12 3460-3465 (2012).
8. Tuning the Optical Gap of Nanometer-Size Diamond Cages by Sulfurization: A Time-Dependent Density Functional Study *Márton Vörös Tamás Demjén, Tibor Szilvási and Adam Gali* *Physical Review Letters* 108 267401 (2012).
9. Optical identification and electronic configuration of tungsten in 4H- and 6H-SiC *Andreas Gällström, Björn Magnusson, Franziska C. Beyer, Adam Gali, N.T. Son, Stefano Leone, Ivan G. Ivanov, Carl G. Hemmingsson, Anne Henry, Erik Janzén* *Physica B: Condensed Matter* 407 1462-1466 (2012).
10. Anharmonic vibrations of the dicarbon antisite defect in 4H-SiC *F. Yan, R. P. Devaty, W. J. Choyke, A. Gali, T. Kimoto, T. Ohshima, and G. Pensl* *Applied Physics Letters* 100 132107 (2012).

11. Electrically driven single photon source at room temperature in diamond *N. Mizuochi, T. Makino, H. Kato, D. Takeuchi, M. Ogura, H. Okushi, M. Nothaft, P. Neumann, A. Gali, F. Jelezko, J. Wrachtrup, and S. Yamasaki* Nature Photonics 6 299-303 (2012).
12. Identification of defects at the interface between 3C-SiC quantum dots and a SiO₂ embedding matrix *Márton Vörös, Adam Gali, Efthimios Kaxiras, Thomas Frauenheim, and Jan M. Knaup* physica status solidi b 249 360-367 (2012).
13. Excitation spectrum of point defects in semiconductors studied by time-dependent density functional theory *Adam Gali* Journal of Materials Research 27 897-909 (2012). DOI: 10.1557/jmr.2011.431
14. Excitation Properties of Silicon Vacancy in Silicon Carbide *Adam Gali* Mater. Sci. Forum 717-720 255-258 (2012).
15. Transition Metal Defects in Cubic and Hexagonal Polytypes of SiC: Site Selection, Magnetic and Optical Properties from *ab initio* Calculations *V. Ivády, B. Somogyi, V. Zólyomi, A. Gällström, N.T. Son, E. Janzén, and A. Gali* Mater. Sci. Forum 717-720 205-210 (2012).
16. Electronic Configuration of Tungsten in 4H-, 6H-, and 15R-SiC *A. Gällström, B. Magnusson, F.C. Beyer, A. Gali, N.T. Son, S. Leone, I.G. Ivanov, A. Henry, C.G. Hemmingsson, and E. Janzén* Mater. Sci. Forum 717-720 211-216 (2012)
17. Identification of Niobium in 4H-SiC by EPR and *ab initio* Studies *N.T. Son, V. Ivády, A. Gali, A. Gällström, S. Leone, O. Kordina, and E. Janzén* Mater. Sci. Forum 717-720 217-220 (2012).
18. Local Thermal Expansion and the C-C Stretch Vibration of the Dicarbon Antisite in 4H SiC *R.P. Devaty, Fei Yan, W.J. Choyke, A. Gali, T. Kimoto, and T. Ohshima* Mater. Sci. Forum 717-720 263-266 (2012).

MTA–WIGNER FK LENDÜLET KVANTUMMÉRÉS KUTATÓCSOPORT

MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT

Szilárdtest-Fizikai és Optikai Intézet

H-1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós utca 29–33.

telefon: (1) 392 2222; e-mail: domokos.peter@wigner.mta.hu

Kutatócsoport-vezető: Domokos Péter

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az első év munkájának közvetlen előzménye, hogy ultrahideg atomok Bose-Einstein kondenzátuma és egy optikai rezonátorba zárt sugárzási mező kölcsönhatásában kvantum fázisátalakulást találtak. Egy külső, folytonosan hangolható paraméter adott, kritikus értékénél a rendszer alapállapotának szimmetriája ugrásszerűen megváltozik, miközben a hőmérséklet állandó és lényegében abszolút zérusnak tekinthető. A vizsgált esetben a kondenzátumban lévő atomokat megvilágító lézer intenzitásának növelésével a kondenzátum homogén eloszlásból periodikus rácsba fejlődik. Bebizonyították, hogy ez a fázisátalakulás nyílt rendszerben is bekövetkezik, amikor a rendszert érő környezeti hatások jelentősek. Felismerték, hogy a fázisátalakulásokat osztályozó kritikus exponens megváltozik az egyensúlyi rendszerben bekövetkező átalakuláshoz képest. Eredményük jelentősége, hogy először adtak példát nemegyensúlyi kvantum fázisátalakulásra egy konkrét, kísérletben is tanulmányozott rendszerben, ahol az egyensúlytól való eltávolodás egy folytonos kvantum mérés visszahatásaként következik be.

Atomok Bose-Einstein kondenzátuma és egy szénnanocső közötti kontrollálható mágneses kölcsönhatáson alapuló hibrid „interface” megvalósítására tettek javaslatot. Megmutatták, hogy a csatolás elegendően erős az összetevők közötti kvantuminformáció közvetítéséhez. Konkrét példaként az elektronikusan kontaktált szénnanocsőben folyó áram mérésére adtak eljárást a tübingeni egyetemen, Prof. Fortágh József irányítása alatt működő kísérleti csoporttal együttműködésben. A kvantumgalvanométerben a mezoszkópikus áram zajkorrelációs függvényét az atomtér korrelációs függvényére képezhetjük le, amely már egyatomos felbontással detektálható. A módszert a rangos *Nano Letters* folyóiratban közölték (13.2 az impaktfaktora 2011-ben). A hibrid interfész az elektronikus kvantumtranszport és a kvantumoptika között teremthet kapcsolatot és sokféle további alkalmazás fizikai alapját képezheti.

A kvantum bolyongás unitér, időben visszafordítható dinamika egy zárt kvantumrendszeren. Nyílt rendszert kapunk, ha a bolyongás véletlen elemekkel kiegészített hálózatokon zajlik. A dinamikus perkolációval leírt gráfokon egyes gráfélek véletlenszerűen hiányozhatnak. Ilyenkor a bolyongás során dekoherencia lép fel, ami a kezdetben tiszta állapotok erős keveredéséhez vezet. Gyűrű alakú és lineáris perkolációs gráfon analitikus megoldást adtak a diszkrét idejű kvantum bolyongás lehetséges aszimptotikus állapotaira. Bebizonyították, hogy a teljesen kevert állapot mellett részlegesen kevert, periodikusan oszcilláló és kvázi-periodikus aszimptotikus dinamika is felléphet. Munkájukat a *Physical Review Letters* folyóiratban közölték.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. J. Asbóth; *Symmetries, Topological Phases and Bound States in the One-Dimensional Quantum Walk*; Phys. Rev. B 86, 195414 (2012)

2. G. Kónya, D. Nagy, G. Szirmai, P. Domokos; *Finite-size scaling in the quantum phase transition of the open-system Dicke-model*; Phys. Rev. A 86, 013641 (2012)
3. A. Vukics and P. Domokos; *Adequacy of the Dicke model in cavity QED: a counter-“no-go” statement*; Phys. Rev. A 86, 053807 (2012)
4. Xuereb and P. Domokos; *Dynamical scattering models in optomechanics: Going beyond the ‘coupled cavities’ model*; New Journal of Physics 14, 095027 (2012)
5. Vukics; *C++QEDv2: The multi-array concept and compile-time algorithms in the definition of composite quantum systems*; Computer Physics Communications 183, 1381 (2012)
6. Kollár, T. Kiss, J. Novotny, and I. Jex; *Asymptotic Dynamics of Coined Quantum Walks on Percolation Graphs*; Phys. Rev. Lett. 108, 230505 (2012)
7. O. Kálmán, T. Kiss, J. Fortágh, and P. Domokos; *Quantum Galvanometer by Interfacing a Vibrating Nanowire and Cold Atoms*; Nano Letters 12, 435-439 (2012)
8. G. Szirmai and P. Szépfalussy; *Three-fluid hydrodynamics of spin-1 Bose-Einstein condensates*; Phys. Rev. A 85, 053603 (2012)
9. A. Zamora, G. Szirmai, and M. Lewenstein; *Layered quantum Hall insulators with ultracold atoms*; Phys. Rev. A 84, 053620 (2011)
10. Nagy, G. Szirmai, and P. Domokos; *Critical exponent of a quantum-noise-driven phase transition: The open-system Dicke model*; Phys. Rev. A 84, 043637 (2011)
11. T. Kiss, S. Vymetal, L. D. Tóth, A. Gábris, I. Jex, and G. Alber; *Measurement-Induced Chaos with Entangled States*; Phys. Rev. Lett. 107, 100501 (2011)

(Összesen: 11 cikk, kumulatív impakt faktor 53.464)

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport működését a többi, 2011-ben indult kutatócsoportéhoz képest néhány hónapos késéssel kezdte. Így bár a csoport részlegesen elkezdett működni már 2011 októberében, a kutatócsoport teljes egészében csak 2012 februárjára épült fel, amikor összeállt a csoport gerincét képező szenior gárda nagy része, és a csoportvezetővel hazaérkeztek a vele külföldön tartózkodó diákok is. Ekkor sikerült több, a csoportot átfogó kutatási témát is elindítani.

A csoport első évének számos eredménye közül kiemelkedik az Université Paris Sud (Orsay) kísérleti csoportjával közösen publikált kutatási eredmény. Az együttműködés során a két csoport egy apró szén nanocsőből épített áramkört – úgynevezett egyelektron tranzisztort tanulmányozott. Ez egy olyan mikroáramkör, melyre alacsony hőmérsékleten kontrollált módon, egyenként képesek a kutatók az elektronokat elhelyezni. Egy ilyen áramkör elektromos zajának vizsgálata igen fontos az alkalmazások szempontjából, de ugyanakkor fontos információt hordoz a fizikusok számára is, mert ezeknek a parányi áramköröknek a viselkedését már a kvantummechanika törvényei határozzák meg. A két kutatócsoport ennek az elektromos zajnak a tanulmányozására fogott össze: a Lendület-csoport kutatói kifejlesztettek egy olyan, a részecskefizikusok által is használt módszerekhez hasonló számítási módszert, melynek segítségével meghatározható ezeknek a parányi áramköröknek az elektromos zaja. A kísérleti csoport pedig egy általa már korábban kifejlesztett ún. on-chip technológiát használt, melyben a parányi szupravezető detektort és a zajforrásként működő nanocsövet egyetlen mikroáramkörben integrálták. Így sikerült a világon először nagyfrekvenciás zajméréseket végezniük egy ilyen egyelektron tranzisztoron, és azt összevetni az elméleti számításokkal, amelyekkel a mért adatok jó egyezést mutattak. Ezeket az eredményeket végül a *Physical Review Letters* folyóirat közölte, ahol a közlemény a kitüntetett Editor's Choice címet is megkapta.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Folyóiratközlemények

1. [Kanasz2012] M. Kanász-Nagy and G. Zaránd, *Global superfluid phase diagram of a three-component fermion mixture with magnetic ordering*, Phys. Rev. B 86, 064519 (2012).
2. [Thomas2012] Mark Thomas, Torsten Karzig, Silvia Viola Kusminskiy, Gergely Zaránd, and Felix von Oppen, *Scattering theory of adiabatic reaction forces due to out-of-equilibrium quantum environments*, Phys. Rev. B 86, 195419 (2012).
3. [Basset2012] J. Basset, A. Yu. Kasumov, C. P. Moca, G. Zaránd, P. Simon, H. Bouchiat, and R. Deblock, *Measurement of Quantum Noise in a Carbon Nanotube Quantum Dot in the Kondo Regime*, Phys. Rev. Lett. 108, 046802 (2012).

4. [Barca2012] G. Barcza, E. Szirmai, Ö. Legeza, J. Sólyom, *Emergence of Quintet Superfluidity in the Chain of Partially Polarized Spin-3/2 Ultracold Atom*, Phys. Rev. A 86, 061602 (2012).
5. [Crépin2012] F. Crépin, G. Zaránd, and P. Simon, *Mixtures of ultracold atoms in one-dimensional disordered potentials*, Phys. Rev. A 85, 023625 (2012).
6. [Csonka2012] Sz. Csonka, I. Weymann, and G. Zarand, *An electrically controlled quantum dot based spin current injector*, Nanoscale 4, 3635 (2012).
7. [Dóra2012a] Balázs Dóra, Jérôme Cayssol, Ferenc Simon, and Roderich Moessner: *Optically Engineering the Topological Properties of a Spin Hall Insulator*, Phys. Rev. Lett. 108, 056602 (2012).
8. [Dóra2012b] B. Dóra, A. Bácsi, G. Zaránd: *Generalized Gibbs ensemble and work statistics of a quenched Luttinger liquid*, submitted to Phys. Rev. Lett. [arXiv:1203.0914].
9. [Fábián2012] G. Fábián, B. Dóra, Á. Antal, et al: *Testing the Elliott-Yafet spin-relaxation mechanism in KC8: A model system of biased graphene*, Phys. Rev. B 85, 235405 (2012)
10. [Moca2011] C. P. Moca, I. Weymann, and G. Zarand, *Theory of ac spin current noise and spin conductance through a quantum dot in the Kondo regime: Equilibrium case*, Phys. Rev. B 84, 235441 (2011).
11. [Moca2012] C. P. Moca, A. Alex, J. von Delft, and G. Zarand, *Non-abelian Anderson model with SU(3) symmetry: A numerical renormalization group approach*, Phys. Rev. B 86, 195128 (2012).
12. [Rapp2011] Á. Rapp, P. Schmitteckert, G. Takacs, G. Zaránd, *Asymptotic scattering and duality in the one-dimensional three-state quantum Potts model on a lattice*, New Journal of Physics (in print).
13. [Töke2012] C. Töke and J. K. Jain: *Multi-component fractional quantum Hall states in graphene: SU(4) versus SU(2)*, J. Phys.: Condens. Matter 24, 235601 (2012).

Kéziratok

[Cayssol2012] Jérôme Cayssol, Balázs Dóra, Ferenc Simon, Roderich Moessner, *Floquet topological insulators*, submitted to Phys. Rev. Lett., arXiv:1211.5623.

[Pollmann2012] Frank Pollmann, Masudul Haque, Balázs Dóra, *Linear quantum quench in the Heisenberg XXZ chain: Out of equilibrium Luttinger liquid description of a lattice system*, submitted to Phys. Rev. Lett., arXiv:1211.1195

[Sári2012] J. Sári and C. Töke, *Theory of inter-Landau level magnetoexcitons in bilayer graphene*, submitted to Physical Review B, arXiv:1209.0638

[Boross2012] P. Boross, B. Dora, A. Kiss, F. Simon, *A unified theory of the Elliott-Yafet and the D'yakonov-Perel' spin-relaxation mechanisms*, arXiv:1211.0826

MTA–ELTE LENDÜLET BIOFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

ELTE TTK FIZIKAI INTÉZET

Biológiai Fizika Tanszék

1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.

telefon: (1) 372 2766; e-mail: derenyi@elte.hu

Kutatócsoport-vezető: Derényi Imre

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Lipid membránoknak szilárd felületek közelében mutatott viselkedése mind orvosi, mind pedig technológiai szempontból kiemelkedő jelentőségű. Egy zürichi csoporttal együttműködésben a kutatócsoport kidolgozott egy újfajta eljárást lipid nanocsőhálózatok létrehozására, jól kontrollálható hidrodinamikai áramlások alkalmazásával. A lipid molekulák biokompatibilitása miatt az ilyen nanocsövekkel borított felületek kiválóan alkalmazhatók biológiai célokra. Ezen túlmenően elméleti módszerekkel vizsgálták szilárd felületre kitapadt liposzómák deformációjának, kiszakadásának és szétterülésének dinamikáját. Módszereikkel sikerült bepillantást nyerni ezen folyamatok részleteibe, majd feltérképezni, hogy milyen paraméterek mellett miként zajlik a kiszakadás folyamata (pl. egyetlen pórus megjelenését követően vagy számos tranzienst pórus megjelenése és visszazáródása után).

A biológiai folyamatok nagy részét fehérjék irányítják. Működésük során konformációváltozásokon esnek át. Ezeket a molekuláris mozgásokat általában nemcsak a külső közegben való súrlódás, hanem fehérjék saját belső súrlódása is fékezi. Ugyanakkor a belső súrlódásnak mind a fizikai eredete, mind pedig a jelentősége máig ismeretlen. A kutatócsoport tagjai elméleti úton felállítottak egy modellt (két reakciókoordináta flexibilis csatolásán keresztül) a belső súrlódás eredetének magyarázatára. A modell numerikus szimulációja számos kísérleti eredményt helyesen reprodukált. Jelenleg folyamatban van a fehérjék belső súrlódásának atomi szintű molekuladinamikai vizsgálata is.

A modern evolúcióelméleti kutatások egyik aktuális témaköre az élő rendszereknek a genetikai és környezeti perturbációkkal szemben tapasztalható nagyfokú robusztusságának jellemzése, valamint eredetének feltárása. Nagy statisztikájú szimulációs vizsgálatokat folytattak mikro-RNS molekulák, valamint modell rácsfehérjék térszerkezetére vonatkozóan. Mindkét esetben arra az általánosnak tűnő következtetésre jutottak, hogy a pontmutációknak a térszerkezetre való hatása megdöbbentő pontossággal és egyszerűséggel jellemezhető egy effektív, hőmérséklet-szerű paraméterrel.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. K. Sugihara, M. Chami, I. Derényi, J. Vörös, and T. Zambelli: Directed self-assembly of lipid nanotubes from inverted hexagonal structures. *ACS Nano* 6, 6626-6632 (2012). doi:10.1021/nn300557s
2. Rauscher, I. Derényi, L. Gráf, and A. Málnási-Csizmadia: Internal Friction in Enzyme Reactions. *IUBMB Life* 65, 35-42 (2013). doi:10.1002/iub.1101

MTA–ELTE LENDÜLET DINOSZAURUSZ KUTATÓCSOPORT

ELTE TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

Földrajz–Földtudományi Intézet

1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/c

telefon: (1) 372 2500/8722; e-mail: hungaros@freemail.hu

Kutatócsoport-vezető: Ősi Attila

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

1. *Iharkút, az „ígéret földje”*. 2011 nyarán is megszervezték a háromhetes, 22 fős ásatást és leletmentést az iharkúti ősgerinces lelőhelyen. A szisztematikus ásatások és iszapolási munkálatok során összesen közel 1000 csontmaradvány került elő a felső-kréta (85 millió évvel ezelőtti) időszaki rétegekből. A begyűjtött leletek többek között a Rhabdodontidae és *Hungarosaurus* dinoszauruszokra vonatkozóan szolgáltak új információval. A csontmaradványok mellett nagy számban kerültek elő növényi fossziliák, melyek különösen fontosak a terület egykori környezetének rekonstruálásában. A terepei munkák mellett berendezték Magyarország első, csontszövettani vizsgálatokra alkalmas laboratóriumát az ELTE TTK Földrajz–Földtudományi Intézetében.

2. *Mochlodon vorosi: egy új, kis termetű dinoszaurusz a Bakonyból*. Egy új növényevő dinoszaurusz diagnosztikus maradványai kerültek elő Iharkútról. A Rhabdodontidae dinoszauruszok családjába tartozó *Mochlodon vorosi* az Ausztriából ismert faj legközelebbi rokona. A csoport minden tagján elvégzett csontszövettani elemzések és testméret-evolúciójuk vizsgálata kimutatta, hogy az általánosan elfogadott nézettel ellentétben a nyugat-európai *Rhabdodon* óriásnövéssű volt, az erdélyi *Zalmoxes* nem tekinthető szigetlakó törpének, míg a magyar és osztrák fajoknál a szigetethatásból eredő törpenövés sokkal valószínűbb.

3. *A Hungarosaurus és a páncélos dinoszauruszok világa*. Megkezdték a páncélos dinoszauruszok, köztük a *Hungarosaurus* több irányú vizsgálatát. Egyrészt céljuk, hogy nyomon kövessék a páncélos dinoszauruszok táplálkozásmechanizmusának evolúciós lépéseit, melyhez számos faj, így a *Hungarosaurus tormai* fogkopás-mintázatát is elemeztük. Előzetes eredményeik arra utalnak, hogy a primitív Ankylosauriákhoz képest egyes fejlett Ankylosauridaeknél egy egészen komplex állkapocsmozgás jelent meg, mely összefügghet ezen csoport tagjainak hatékonyabb táplálékfeldolgozásával. A *Hungarosaurus* egy új koponyaleletének CT-vizsgálata révén pedig következtetni tudnak a hazai faj különböző agyterületeinek fejlettségi szintjére, melyből egyes viselkedésökológiai aspektusra is fény derülhet, illetve tisztázni tudják az európai páncélos dinoszauruszok taxonómiáját.

4. *A repülő hüllők paleobiológiája*. Bebizonyították, hogy a repülő hüllőkre nem volt jellemző a koponya egyes részeinek mozgékonyasága (kinezis). A *Rhamphorhynchus muensteri* csontszövettani vizsgálata révén pedig rekonstruálni tudták e faj egyedfejlődési stratégiáját, mely révén pontosabb betekintést nyertek a pteroszauruszok életmenet-stratégiájának diverzitásába, melyet az iharkúti azhdarchid pteroszaurusz, a *Bakonydraco galaczi* csontszövettani vizsgálatánál is figyelembe kell venni.

5. A krokodilok rágásmechanizmusa és ennek ökológiai jelentősége a kréta időszak déli kontinenseken. A krokodilok állkapocs-mechanizmusának és táplálékfeldolgozásának evolúciójával kapcsolatos vizsgálataik arra utalnak, hogy a földtörténet során élt krokodilok életmódja, táplálkozása sokkal változatosabb és komplexebb volt, mint a mai csoportoké, és egyes fajoknál már-már emlősszerű fejlettségűvé vált. Ez azt jelzi, hogy egyes esetekben e

heterodont formák komoly versenytársai lehetnek az akkor még sokkal kevésbé diverz emlősöknek.

6. *Foxemys trabanti*: egy új nyakfordító teknős. A kutatócsoport egy új nyakfordító teknős fajt (*Foxemys trabanti*) publikált Iharkútról, és filogenetikai vizsgálat segítségével megállapította, hogy az új faj legközelebbi rokonai Franciaországból valók. Emellett elkezdtek a Kárpát-medence késő-kréta teknős faunáinak taxonómiai revideálását és a teknősök korai evolúcióját általánosságban érintő kérdések megoldását.

7. A vizek csúcsragadozója, az iharkúti moszaszaurusz. Elvégezték az új, iharkúti moszaszaurusz anatómiai, taxonómiai leírását. Ez az őshüllő egy 6 méteres testhosszúságot elérő, úszáshoz kiválóan alkalmazkodott forma volt, mely minden bizonnyal a vízi környezetek csúcsragadozója lehetett. A hazai faj különlegessége, hogy e diverz csoport többi tagjától eltérően, a magyar faj édesvízi környezethez alkalmazkodott.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Tudományos cikkek:

1. **Ósi, A., Prondvai, E.,** Butler R, Weishampel DB 2012. Phylogeny, histology and inferred body size evolution in a new rhabdodontid dinosaur from the Late Cretaceous of Hungary. *PLoS ONE* 7(9): e44318. doi:10.1371/journal.pone.0044318. IF: 4.411
2. **Ósi, A.** 2012. Dinoszauruszok Magyarországon. GeoLitera Kiadó, Szeged, pp. 168.
3. **Prondvai, E.,** Stein, K, **Ósi, A.,** & Sander, M. 2012. Life history of *Rhamphorhynchus* inferred from bone histology, and the diversity of pterosaurian growth strategies. *PLoS ONE* 7(2): e31392. doi:10.1371/journal.pone.0031392. IF: 4.411
4. **Ósi, A.,** L. Makádi, **M. Rabi,** Z. Szentesi, G. Botfalvai, P. Gulyás. 2012. The Late Cretaceous continental vertebrate fauna from Iharkút, western Hungary: a review. *Bernissart Dinosaurs and Early Cretaceous Terrestrial Ecosystems* (ed. P. Godefroit), Indiana University Press, pp. 533-568.
5. **Rabi, M.,** Tong, H. & Botfalvai, G. 2012. A new species of the side-necked turtle *Foxemys* (Pelomedusoides: Bothremydidae) from the Late Cretaceous of Hungary and the historical biogeography of the Bothremydini. *Geological Magazine* 149: 662–674. IF: 2.207
6. **Rabi, M.,** Vremir, M. & Tong, H. 2012. Preliminary overview of Late Cretaceous turtle diversity in eastern Central Europe (Austria, Hungary, and Romania), pp. 307–336 *In* “Morphology and Evolution of Turtles: Origin and Early Diversification” (eds: D. B. Brinkman, P. A. Holroyd, and J. D. Gardner), Springer, Dordrecht.
7. Wings, O., **Rabi, M.,** Schneider, J. W., Schwermann L., Sun G., Zhou, C.-F., & Joyce, W.G. 2012. An enormous Jurassic turtle bone bed from the Turpan basin of Xinjiang, China. *Naturwissenschaften* 99: 925–935.

Konferenciakiadványok

1. **Ósi, A., Prondvai, E.,** Butler, R. és D. Weishampel 2012. Phylogeny, histology and inferred body size evolution in a new rhabdodontid dinosaur from the Late Cretaceous of Hungary. *10th Meeting of the European Association of Vertebrate Paleontologists*, Teruel, Spain. Abstract volume, p. 175.

2. **Prondvai E., Ósi A.,** Butler RJ. 2012. Size matters – Contribution of bone histology-based body size estimates to the understanding of the ornithomimid family Rhabdodontidae. *10th Annual Meeting of the European Association of Vertebrate Paleontologists*, Teruel, Spain. Abstract Volume, p. 197-198.
3. Stein K., **Prondvai E.** 2012. No fibrous (woven) bone in sauropod fibrolamellar bone? *72nd Annual Meeting of the Society of Vertebrate Paleontology*, Raleigh, USA.
4. **Ósi, A., Prondvai, E.,** Butler, R. és D. Weishampel 2012. Phylogeny, histology and inferred body size evolution in a new rhabdodontid dinosaur from the Late Cretaceous of Hungary. *72nd Annual Meeting of the Society of Vertebrate Paleontology*, Raleigh, USA.
5. **Rabi, M. & Delfino, M.** 2012. A Reassessment of the “Alligatoroid” Eusuchian from the Late Cretaceous of Hungary and its Taxonomic Implications. *10th Meeting of the European Association of Vertebrate Paleontologists*, p. 203–206.
6. **Rabi, M. & Joyce, W. G.** 2012. New Insights into the Evolution of the Carotid Circulation System in Eucryptodiran Turtles. *Symposium on Turtle Evolution, University of Tübingen*, 2012 June 01-04, Program and Abstracts, p. 36.
7. Vremir, M., **Rabi, M. & Csiki-Sava, Z.** 2012. A New Dortokid Panpleurodire from the Maastrichtian of Transylvania, Romania. *Symposium on Turtle Evolution, University of Tübingen*, 2012 June 01-04, Program and Abstracts, p. 47.
8. **Rabi, M., Wings, O. & Joyce, W.G.** 2012. The Homology of the Basipterygoid Process in Eucryptodiran Turtles and its Phylogenetic Implications. *72nd Annual Meeting Society of Vertebrate Paleontology Raleigh, NC, USA*, October 17 – 20, 2012. Program and Abstracts, p. 159.
9. **Makádi, L., Caldwell, M., & Ósi, A.** 2012. The fresh water mosasauroid (Upper Cretaceous, Hungary) and a new clade of basal mosasauroids. *PLoS ONE* 7(12): e51781.

Tudományos ismeretterjesztő cikkek:

1. Ósi, A., 2012. Egyetlen foggal kezdődött. *Élet és Tudomány*, 66(46):1446-1449.
2. Ósi, A., 2012. Laczkó Dezső leghíresebb őslénytani lelete – a kavicsfogú álteknős (*Placochelys placodonta*) a bakonyi felső-triászból. *Természet Világa*, 143. évf. 4.sz. 2012. április

MTA–SZTE LENDÜLET FOLDAMER KUTATÓCSOPORT

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM, GYÓGYSZERKÉMIAI INTÉZET

6720 Szeged, Eötvös u. 6

telefon: (62); e-mail: martinek@pharm.u-szeged.hu

Kutatócsoport-vezető: Martinek Tamás

A 2012-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A projekt fő célja az önrendeződő polimerek (foldamerek) tanulmányozása és új biomimetikus rendszerek létrehozása. Ezek kiemelt alkalmazási lehetősége a modern hatóanyag-felfedezésben van. A kutatócsoport új, a biológiai alkalmazások szempontjából ígéretes nagyfelszínű foldamer-szerkezeteket kíván kifejleszteni és protein-protein kölcsönhatások gátlására felhasználni. A munka az alábbi négy fő területen történik:

1. Új, nagy átmérőjű biomimetikus hélixek létrehozása;
2. Meghatározott szerkezetű, kontrollált hélixkötegek és nem aggregálódó β -szendvics mimetikumok létrehozása;
3. Fehérje-fehérje kölcsönhatás gátlása foldamerrel: β -amiloid ($A\beta$) oligomer aggregátumok neurotoxikus hatásának kivédése;
4. Foldamerekkel a Galektin-1 (Gal-1) protein tumordajka blokkolása.

Az első évben kialakították a kutatócsoportot, amelyben egy posztdoktor, egy végzős és három elsőéves PhD-hallgató, valamint egy laboráns vesz részt. Az első év fontos célkitűzése volt egy izotermális titrálási kaloriméter beszerzése, amelynek segítségével a foldamerek és a célzott fehérjék kölcsönhatása jól jellemezhető, ezen kívül komplementer adatokat szolgáltat a meglévő NMR spektroszkópiás módszerek mellett. A csoport 2011 júliusában teljes létszámban megkezdte munkáját. A jelen beszámoló időpontjáig az alábbi, referált közleményekben már publikált eredményeket érték el.

1. Új biomimetikus hélixeket terveztek és jellemeztek kísérletesen. Az általuk felismert sztereo-kémiai mintázatok módszerével két új hélix-típust hoztak létre: $\alpha\beta$ -H16/18 és az $\alpha\alpha\beta$ -H9/12/9/10 hélixeket. Ezeknek a hélixeknek felszínén a proteinogén oldalláncok nagy sűrűségben és kézenfekvő módon prezentálhatók úgy, hogy a foldamerek természetes peptidekkel szembeni előnyeit megtartják. Ezt az eredményt magas impaktú folyóiratban közölték.
2. Nagy térkitöltésű bicikloheptén oldalláncot tartalmazó β -aminosavak és β^3 -aminosavak felhasználásával terveztek. Így sikeresen előállították a β -H18 hélixet, amely a közlés pillanatában a legnagyobb átmérőjű alifás foldamerhélix. Az eredmény jelentősége továbbá abban áll, hogy a nagy átmérőjű hélix önasszociációval stabilizálódik, ami egy általános viselkedést vetít előre. Ez a szerkezet a Royal Chemical Society Foldamerekkel foglalkozó tematikus kiadványában jelent meg.
3. Foldamerszekvenciákat terveztek és szintetizáltak, amelyek képesek lehetnek a toxikus $A\beta$ -oligomerek felszínének felismerésére– követve a fragmens-alapú hatóanyagtervezés elveit. A legjobb anyagot négyágú csatolóelemekre (dendrimer) kapcsolták, és kimutatták az erős kölcsönhatást az $A\beta$ -aggregátumokkal. Az új anyagot *ex vivo* elektrofiziológiai kísérletekben vizsgálták. Az *ex vivo* eger hippocampuszon végzett memóriarögzülési modellkísérletben (LTP) az új anyag szubmikromólos koncentrációban kivédte az $A\beta$ gátló hatását. Az eredményeket közölték, és két konferencián mutatták be meghívott keynote

előadásokon. Ezzel az eredménnyel megmutatták, hogy a foldamer másodlagos szerkezetek nemcsak a biológiai szerkezetek közvetlen utánzásával használhatók protein kölcsönhatások befolyásolására, hanem általánosabban alkalmazhatók felismerő szegmensként.

A projekt eredményeként új típusú másodlagos és harmadlagos foldamer szerkezeteket kapnak majd, amelyek gyógyszerkémiailag alkalmazásai új utat nyithatnak farmakológiailag fontos fehérje kölcsönhatások gátlásában.

A 2012-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szolnoki E, Hetenyi A, Martinek TA*, Szakonyi Z, Fulop F; Self-association-driven transition of the beta-peptidic H12 helix to the H18 helix. *Organic & Biomolecular Chemistry* 10:(2) pp. 255-259. (2012); IF: 3.451
2. Martinek TA, Fulop F; Peptidic foldamers: ramping up diversity. *CHEMICAL SOCIETY REVIEWS* 41:(2) pp. 687-702. (2012); IF: 26.583
3. Berlicki L, Pils L, Wéber E, Mándity I M, Cabrele C, Martinek TA*, Fülöp F, Reiser O; Unique α,β - and $\alpha,\alpha,\beta,\beta$ -peptide foldamers based on cis- β -aminocyclopentanecarboxylic acid. *ANGEWANDTE CHEMIE INTERNATIONAL EDITION* 51:(9) pp. 2208-2212. (2012); IF: 12.730
4. Fülöp L, Mándity IM, Juhász G, Szegedi V, Hetényi A, Wéber E, Bozsó Zs, Simon D, Benkő M, Király Z, Martinek TA*. A foldamer-dendrimer conjugate neutralizes synaptotoxic β -amyloid oligomers *PLoS ONE* 7(7): e39485 (2012); IF: 4.092

AZ EGYETEMI LENDÜLET-KUTATÓCSOPORTOK FŐBB MUTATÓI 2012-BEN

Lendület kutatócsoport neve	MTA-ELTE Lendület Biofizikai Kutatócsoport	MTA-SZTE Lendület Foldamer Kutatócsoport	MTA-ELTE Lendület Dinoszaurusz Kutatócsoport	MTA-BME Lendület Egztotikus Kvantumfázisok Lendület Kutatócsoport
Támogatás kezdete	2011. július	2011. július	2011. július	2011. július
Kutatócsoport-vezető	Derényi Imre	Martinek Tamás	Ósi Attila	Zaránd Gergely
Kutatócsoport tagjainak száma (kutatók)	3	5 (PhD hallgató)	2 (PhD hallgató)	12 (5 kutató, 3 PhD hallgató, 3 MSc diák, 1 BSc diák)
Kutatási téma címe	Elméleti biológiai fizikai kutatócsoport	Peptid foldamerek: szerkezet és alkalmazások	A 85 millió éves ökoszisztéma nyomában: az iharkúti dinoszaurusz több szempontú vizsgálata	Egztotikus kvantum-fázisok nem egyensúlyi dinamikája
A program keretében a beszámolási évre (2011. július 1 - 2012. június 30.) kapott támogatás összege	20 035	44 371	26 135	13251
A beszámolási évben elnyert hazai kutatásfinanszírozási pályázat (forrás, összeg)	OTKA: 12000 e Ft	OTKA: 18000 e Ft Servier-Egis K+F: 8500 e Ft	OTKA: 33 108 e Ft	OTKA: 10740 e Ft
A beszámolási évben elnyert külföldi kutatásfinanszírozási pályázat (forrás, összeg e Ft)				ANR-UEFISCDI: 67200 e Ft
A beszámolási évben a témában született impaktfaktoros publikációk száma		4	9	7
A beszámolási évben a témában született publikációk scientometriai mutatói (összesített IF, független hivatkozás)		IF: 46,856, cit: 7	IF: 15,598, cit: 11	IF: 31.616, cit > 10
A beszámolási évben hazai rendezvényen tartott tudományos előadások száma	1	2	7	8
A beszámolási évben külföldi rendezvényen tartott tudományos előadások száma	1	4	8	12
PhD hallgatók száma	1	4	2	3

