

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KUTATÓHELYEINEK  
2008. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

I.

Matematika és természettudományok

Budapest

2009

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

Banczerowski Januszné főosztályvezető

Hegedűs Kisztna  
Herczeg György  
Horváth Csaba  
Redler László

Idei Miklós

ISSN 2060-680X

F.k.: Banczerowski Januszné

Akaprint Kft. F.v.: Freier László

## TARTALOMJEGYZÉK

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

### *Matematikai és természettudományi kutatóintézetek*

Atommagkutató Intézet .....	11
Földrajztudományi Kutatóintézet .....	27
Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet .....	36
Geokémiai Kutatóintézet .....	46
Izotópkutató Intézet .....	56
Kémiai Kutatóközpont .....	67
Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet .....	69
Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet .....	80
Kémiai Kutatóközpont Nanokémiai és Katalízis Intézet .....	90
Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézet .....	101
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet .....	112
KFKI Atomenergia Kutatóintézet .....	123
KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet .....	134
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet .....	150
Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet .....	165
Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet .....	178
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet .....	196

### *Matematikai és természettudományi támogatott tanszéki kutatóhelyek*

BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport .....	213
BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport .....	217
BME Fémtechnológiai Kutatócsoport .....	221
BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport .....	224
BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport .....	228
BME Irányítástechnológiai Kutatóintézet .....	232
BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport .....	236
BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport .....	240
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport .....	244
BME Sztochasztika Kutatócsoport .....	248
BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport .....	252
DE Homogén Katalízis Kutatócsoport .....	256
DE Számelméleti Kutatócsoport .....	260
DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport .....	264
ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport .....	268
ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport .....	272
ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport .....	276

ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport .....	280
ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport .....	284
ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	288
ME Anyagtudományi Kutatócsoport .....	291
ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport .....	295
MTM Paleontológiai Kutatócsoport.....	299
PE Levegőkémiai Kutatócsoport.....	303
PPKE-SE Neurobiológiai és Infobionikai Plaszticitás Kutatócsoport .....	307
SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport .....	311
SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport .....	315
SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport.....	319
SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport.....	323
SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport .....	327
SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport (Társult tag) .....	331
SZTE Reakciókinetikai Kutatócsoport (Társult tag).....	335

## ELŐSZÓ

Amikor a legnagyobb magyar – valóra váltva a műveiben már hosszabb ideje érlelt elhatározását – 1825-ben egy országgyűlési szópárbaj végső érveként felajánlotta birtokainak egyéves jövedelmét a Magyar Tudományos Akadémia előfutárának tekinthető tudós intézmény felállítására, aligha sejtette, hogy ez az intézmény nemcsak évszázados kereteket ad országunk intellektuális tevékenységéhez, de egyszer majd egy politikailag és társadalmilag megosztott és gazdaságilag is nehézségekkel küszködő korban szinte az egyetlen olyan közintézménnyé válik, amely osztatlan bizalmat élvez Magyarországon.

Jó érzés azt tapasztalni, hogy az emberek szemében az Akadémia testesíti meg a nemzeti konszenzust. Ez természetesen nem véletlen. Az Akadémia közel két évszázados tevékenysége során több-kevesebb sikerrel, mindig igyekezett függetleníteni magát az aktuálpolitikai eseményektől, és véleményét a tudomány állásának megfelelően, a szakmai ismeretek alapján kialakítani és közreadni.

Aki közpénzből közfeladatot lát el, azt különös felelősség terheli. A Magyar Tudományos Akadémiának következőképpen tevékenysége során két kritériumnak is eleget kell tennie: egyrészt átláthatónak, másrészt hatékonynak és eredményesnek kell lennie. A tudományos kutatás összetett tevékenység, amelyben ötvöződik a szakmai képzettség, a szorgalom, az infrastrukturális háttér, az anyagi ráfordítás, az együttműködés, az intuíció, és végül, de nem utolsósorban kicsit talán a szerencse is.

Az emberiség történelme során bebizonyosodott, hogy e tényezők mindegyikének komoly szerepe van a tudományos eredmény megszületésében. Mert hiába van egy fantasztikus ötlet, ha annak kivitelezése nem lehetséges, hiába a szerencsés véletlen, ha képzettség és tudás hiányában nem képes felismerni és hasznosítani azt a kutató, és hiába a szorgalom, ha az emberi és az anyagi feltételek nem teszik lehetővé annak érvényesülését.

Az Akadémia kutatóhálózatának, a kutatóhálózatot irányító, koordináló és kiszolgáló szervezetnek az a legfontosabb feladata, és egyben az eredményesség előfeltétele is, hogy biztosítsa a tudományos kutatás számára e tényezők lehetőleg minél teljesebb konstellációját.

A kutatóhálózat tevékenységét immár hagyományosan bemutató kötetek az elért eredmények közzététele mellett számszerű tájékoztatást is adnak az elvégzett munka háttéréről, körülményeiről is: az érdeklődő és a mecénás olvasó megtudhatja, hányan, milyen

forrásokból, milyen hazai és nemzetközi együttműködéssel, mit alkottak, mit tettek le az ország és a világ asztalára.

Az intézetek beszámolóiból kitűnik, hogy a kor kihívásaira válaszolva, a kutatók hangsúlyt fektetnek arra, hogy elért eredményeiket a felsőoktatásban és a doktori képzésben is ismertté tegyék, hiszen elméleti jelentőségük mellett egyre nagyobb igény mutatkozik azoknak a gyakorlatban történő hasznosítására. Ezt mutatja az is, hogy a kormányzati szféra az Akadémiával megvalósuló stratégiai együttműködés keretében a kutatóhálózat eredményeire is támaszkodik.

Széchenyi István ugyancsak az alapítás évében közreadott megfogalmazása szerint a kutatáshoz a tudás önmagában nem elegendő, az eredményességhez, az előrelépéshez annak szervezéséről, működtetéséről is gondoskodni kell.

„Meggyőződésem, hogy a természet titkainak felfedezésében – fürkésző értelmünk megszervezése után, amellyel Isten bennünket ellátott – máris hatalmas lépést teszünk előre”. E gondolatok jegyében ajánlom e kötetet az olvasók figyelmébe.

Budapest, 2009. május

Németh Tamás  
az MTA főtitkára

## A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

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

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

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

<sup>2</sup> A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2008. év végi tényleges átlagléttszáma. Az átlagléttszámba beletartoznak a részmunkaidőben foglalkoztatottak is. Ezekben az esetekben a részmunkaidősök létszáma a ledolgozott órák alapján lett teljes munkaidős létszámmá átszámítva.

<sup>3</sup> Mindazon publikációk száma, amelyeket az illető kutatóhely második indexszel megjelölt helyen számbavett szerzője jelentetett meg (tehát azok és csak azok cikkei, akik 2008-ban az intézet állományában voltak). A publikációkba beletartoznak: a tudományos és ismeretterjesztő munkák, tanulmány, cikk, könyv, könyvfejezet, jegyzet, atlasz, tematikus térkép.

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

<sup>5</sup> A folyóiratok 2007. évi impakt faktorait használtuk.

<sup>6</sup> A tárgyévben a kutatóhely állományában lévő kutatóknak az adott kutatóhelyen vagy jogelődjében az utolsó 15 évben (1993–2008 között) született cikkeire való 2008-ban történt hivatkozások száma (az egyszerű hivatkozás, valamint egy tudományos munkáról szóló recenzió tartozik ide), az MTA TPA számára leadott listák alapján. A bibliográfiai adatként szereplő művek száma itt nem szerepel.

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

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

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

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

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

<sup>12</sup> Mindazon személyek száma, akik hazai felsőoktatási intézményben rendszeresen (nem feltétlen heti rendszerességgel), tantervi keretek között oktatnak. A külföldi egyetem számára végzett oktatási tevékenységet, a felkérésre tartott előadásokat és a szakdolgozat, diplomamunka, PhD-téma vezetését a beszámoló III., illetve IV. pontjában találjuk. Az adatok a 2007/2008-as tanév második és a 2008/2009-es tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

<sup>13</sup> A kutatóhely állományában lévő kutatók által felsőfokú oktatási intézményben tartott, hivatalosan bejegyzett reguláris és speciális előadások valamint gyakorlatok 2007/2008-as tanév *második* és a 2008/2009-es tanév *első* szemeszteri együttes óraszám. Itt nem tüntettük fel az intézményben TDK, diploma illetve PhD-hallgatók által eltöltött, vagy rájuk fordított óraszámot.

<sup>14</sup> A 2008. évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatást csökkentettük a következő tételekkel:

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

<sup>15</sup> 2008-ban az MTA keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyek száma.

<sup>16</sup> A teljes saját bevétel megegyezik a pályázati, szabadalmi és a nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevételek összegével.

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

<sup>18</sup> A Nemzeti Fejlesztési Terv I. keretében (GVOP, stb.) elnyert támogatások.

<sup>19</sup> Ebbe a kategóriába tartoznak azoknak a kutatási célú megbízásoknak a bevételei, amelyeknél a pályázatok kiírója nem magyarországi szervezet. Ezeket a bevételeket ÁFA nélküli összegben és alvállalkozói rész nélkül vettük figyelembe.

<sup>20</sup> Az az összeg, amelyet a kutatóhely koordinátorként más intézményekhez, tanszékekhez, vállalkozókhöz továbbított a tárgyévben.



MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZETEK



**ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET**  
4026 Debrecen, Bem tér 18/c, 4001 Debrecen, Pf. 51.  
Telefon: 52-509-200, Fax: 52-416-181  
e-mail: director@atomki.hu, honlap:www.atomki.hu

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

Az intézet alapfeladatai 2008-ban nem változtak; ezek az alapító okiratban foglaltak szerint a következők: alap- és alkalmazott kutatások folytatása az atommagfizikában és atomfizikában; fizikai ismeretek és módszerek alkalmazása más tudományágakban (anyagtudomány és anyagvizsgálat, földtudományok és környezetkutatás, orvosi-biológiai kutatások stb.) és a gyakorlatban (ipar, mezőgazdaság, orvosi gyakorlat stb.); alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése; közreműködés a posztgraduális képzésben és a felsőoktatás feladatainak ellátásában.

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

### *Részecskefizika*

A második kvantumszindinamikai sugárzási korrekciók számítására alkalmas általános módszer fejlesztése során sikerült kiszámítani az egyszerűen feloldatlan (lágy vagy kollineáris) partonsugárzást leíró közelítő mátrixelemek integráljait a faktorizált feloldatlan parton fázisterén. (Ezek az eredmények nemzetközi együttműködésben születtek. A kutatócsoport 2 főből áll egy Atomki-tag részvételével. Az intézeti ráfordítás 3 MFt, amiből 2 MFt pályázati forrásból származik. Rövid jelöléssel: [2 (1) fő, 3 (2) MFt])

Elkészült az ATLAS (A Toroidal Lhc ApparatuS) CSC (Computing System Commissioning) Book. Ez olyan analízisek gyűjteménye, amiket referenciaként lehet majd használni az LHC (Large Hadron Collider) adatainak első feldolgozásakor. [2500 (1) fő, 5 (0) MFt]

Az ATLAS detektor triggerrendszere felkészült az LHC-ből érkező adatok fogadására. [500 (1) fő, 2,5 (0) MFt]

### *Magfizika*

A franciaországi nemzeti nehézion-laboratóriumban (GANIL) végzett kísérletben a neutroninstabilitási vonal közelében elhelyezkedő szén atommagok szerkezetét vizsgálták radioaktív nyalábok fragmentációjával. A páros-páros szén izotópok első  $2^+$  állapotának energiaszisztematikáját meghatározva kimutatták, hogy a nehéz szén atommagokban az  $N=14$  alhéjzáródás eltűnik. Ez a jelenség erős analógiát mutat az  $N=20$  héjzáródásnál megfigyelttel, ami arra utal, hogy a nagy neutrontöbblet esetén bekövetkező héjszerkezet-változásokban általános mechanizmusok játszanak szerepet. [31 (6) fő, 10 (0,5) MFt]

Az  $A=19,20,21,22$  tömegszámú atommagokban a neutrontöbbletnek az effektív nukleon-nukleon kölcsönhatásra gyakorolt hatását elemezték a GANIL-ban végzett stabil és radioaktív nyalábos vizsgálatokkal. Azt találták, hogy a  $^{19-22}\text{N}$  atommagok energiaspektruma a héjmodell jóslatához képest össze van nyomva, ami az effektív neutron-neutron kölcsönhatás gyengülésével értelmezhető. [38 (4) fő, 10 (0,5) MFt]

Az  $^{45}\text{Ar}$  atommag szerkezetét vizsgálták (d,p) reakcióban a GANIL-ban. Meghatározták a gerjesztett állapotok energiáját, szögeloszlását és spektroszkópiai faktorát. Már egészen alacsony energián az  $N=28$  héjzáródáson átvélő intruder állapotok találhatóak, ami az  $N=28$  neutron héjköz csökkenését jelzi. [23 (2) fő, 5 (0) MFt]

Egy új, nagyenergiás elektron-pozitron párspektrométer segítségével anomálishan viselkedő elektron-pozitron párokat figyeltek meg a  $^8\text{Be}$  17,6 MeV-es  $1^+ \rightarrow 0^+$  átmenetének vizsgálata során. A párok mért szögkorrelációja szignifikáns eltérést mutatott, a belső párkeltésre vonatkozó kvantum-elektrodinamikai számításoktól. Ezt a viselkedést úgy sikerült értelmezni, hogy feltételezték, az átmenetek során egy könnyű, elektromosan semleges,  $12,0 \pm 2,5$  MeV/ $c^2$  tömegű, axiálvektor ( $J^\pi = 1^+$ ) bozon keletkezett, ami aztán elektron-pozitron párrá bomlott el. [11 (8) fő, 20 (1) MFt]

A  $^{103}\text{Rh}$  és  $^{104}\text{Rh}$  királis-jelölt sávpárjai yrast sávjaiban az állapotok életidejét mérték Doppler-eltolódás módszerrel a Gammasphere detektorrendszer és a Kölnben levő plunger segítségével. Azt találták, hogy a mért életidőkből származtatott  $B(E2)$  értékek váltakozó nagyságúak a páros, illetve páratlan spinű állapotok esetén, a  $B(M1)$  értékek pedig a spin növekedésével csökkenő értékűek. Ezek az eredmények nem támasztják alá a királis értelmezést. [18 (1) fő, 5 (0) MFt]

A  $^{85}\text{Rb}(p,n)^{85}\text{Sr}$  reakció vizsgálata kapcsán bebizonyították, hogy endoterm magreakciók vizsgálatából is lehet közvetlen következtetést levonni a csillagokban lejátszódó reakciók sebességére. [6 (5) fő, 21 (1) MFt]

A  $^{74}\text{As}$  atommag különböző közegekben végbemenő bomlásának tanulmányozásával cáfolták azt az elméletet, miszerint radioaktív magok felezési ideje bizonyos körülmények között erősen függ a bomló magokat körülvevő közegetől. [7 (7) fő, 21 (1) MFt]

A  $^{14}\text{N}(p,\gamma)^{15}\text{O}$  reakcióban az alapállapotú átmenet precíziós mérésével feloldották az irodalmi adatok ellentmondását, és így jelentősen lecsökkentették ezen asztrofizikailag fontos reakció alacsonyenergiás hatáskeresztmetszetének hibáját. [31 (4) fő, 11 (1) MFt]

Az úgynevezett AGB csillagokban kulcsszerepet játszó  $^{18}\text{O}(p,\alpha)^{15}\text{N}$  reakció rezonanciáinak erősségét határozták meg a „trójai faló” elnevezésű módszerrel, igazolva, hogy e mérési technika olyan esetekben is alkalmazható, amikor a vizsgált magreakció gerjesztési függvényében számos rezonancia van. [23 (1) fő, 5,5 (0,5) MFt]

Megerősítették a valencianeutronok lecsatolódásának létezését a  $^{16}\text{C}$  atommag rugalmatlan szórásainak tanulmányozása során. [6 (3) fő, 11 (1) MFt]

Először mérték meg egy neutrongazdag atommagban pygmy-állapotok bomlási mintázatát a  $^{26}\text{Ne}$  atommag Coulomb gerjesztésének segítségével a  $^{25}\text{Ne}+n$  reakciócsatornában. [26 (1) fő, 11 (1) MFt]

Elsőként határozták meg a neutrongazdag  $^{80}\text{Ge}$  atommagban a redukált kvadrupól átmeneti erősséget, aminek az értékéből arra következtettek, hogy az N=50-es szférikus mágikus szám a stabilitási sávtól távol is mágikus marad. [29 (1) fő, 11 (1) MFt]

Felfedeztek egy, az sd-héjból származó proton intruder állapotot a neutrongazdag  $^{13}\text{B}$  atommagban nukleonátadási reakcióban. [29 (1) fő, 11 (1) MFt]

A fűrtösödött (csomósodott vagy klaszterizált) maganyag fázisainak vizsgálata kapcsán feltárták a termikus és nemtermikus (T=0 hőmérsékletű vagy kvantum-) fázisátmenetek közötti hasonlóságokat és különbözőségeket. Megmutatták, hogy a héjmodellszerű és molekulászerű fűrtösödés két különböző fázisnak felel meg, és diszkutálták ezek mikroszkopikus (a nukleonok szabadsági fokait egyenként tekintetbe vevő) leírásának lehetőségét. [8 (2) fő, 6,9 (0,9) MFt]

A Lane-model keretén belül izobár analóg rezonanciák tulajdonságait számolták különböző módszerek segítségével. A csatolt csatornás egyenleteket három különböző eljárással oldották meg. A Berggren-féle bázisfüggvényeket és komplex skálázást alkalmazó közelítések hasonló eredményeket adtak, de az előbbi eljárással a szórési jelenség és a magszerkezet szemléletes fizikai interpretációja sokkal könnyebb. [3 (2) fő, 8 (0) MFt]

Protonnyalábokkal  $^{131}\text{Xe}$ ,  $^{124}\text{Xe}$ ,  $^{\text{nat}}\text{Xe}$  céltárgyakon, deuteronnyalábokkal  $^{\text{nat}}\text{Cd}$ ,  $^{\text{nat}}\text{Xe}$  céltárgyakon előidézett reakciók gerjesztési függvényét mérték és számították ki elméletileg a NAÜ orvosi és ipari alkalmazások szempontjából nagy jelentőségű nukleáris adatbázisának bővítése érdekében. A terápiás izotópok előállítására használt magreakciók adatbázisának létrehozása az elmúlt évben befejeződött. Az adatbázis közzététele web-en megtörtént, kézikönyvének Technical Report formában való megjelentetése folyamatban van. [9 (4) fő, 22 (2) MFt]

A vékonyréteg-aktivációs technika alkalmazásával történő anyag- és kopásvizsgálati módszerek továbbfejlesztése során a másodlagos implantáció módszerét alkalmazták közvetlenül nem aktiválható anyagból készült alkatrészek radioizotópos nyomjelzésére. [4 (3) fő, 20 (10) MFt]

Szimulációkat végeztek kiterjedt bizmutos közegekbeli neutrontranszport tanulmányozására szolgáló kísérleti elrendezésekre vonatkozóan, beleértve magát a kísérletekben használt NE-213 neutrondetektort is. A neutronenergia-tartomány 18 MeV-ig terjedt. A számításokat több különböző adatkönyvtár adatait használva is elvégezték, és összevetették a mért adatokkal. Így újabb információkat nyertek a könyvtárak bizmutra vonatkozó hatáskeresztmetszet-adatainak megbízhatóságára. [6 (1) fő, 2,5 (0) MFt]

### *Atomfizika*

A sztochasztikus variációs módszer és a komplex skálázás segítségével a pozitron–hidrogén rendszer rezonanciaállapotait határozták meg. A korrelációs függvény részletes vizsgálata

megmutatta, hogy az állapotok különböző klaszterizációk megfelelő súlyú keverékei. [4 (2) fő, 8 (0) MFt]

A kételektronos lándzsahegycsúcs (cusp) létezését kimutató korábbi kísérletük eredményei és a Wannier-elmélet alapján elvégzett számítógépes szimuláció közötti eltérés okát vizsgálták. Egy lehetséges magyarázatként feltételezték, hogy a két elektron korrelált mozgását perturbálja az ütközés során ionizálódott céltárgyatomból Coulomb-tere. Ezt az ütközés utáni kölcsönhatást egy egyszerű modellel vették figyelembe a szimulációban. Analízisük végső következtetése az, hogy a korrelált kételektron-állapot kialakulására valószínűleg mindkét töltött centrum (az ionizálódott céltárgyatomból és a távozó lövedékion) hatással van. [2 (2) fő, 5,1 (0,1) MFt]

Elméletileg értelmezték a lítiumszerű oxigén- és fluoratomok hélium- és hidrogén-céltárgyakkal való ütközéseiben a metastabil állapotokból eredő Auger-folyamatoknál kísérletileg tapasztalt drámai hozamnövekedést. Megmutatták, hogy ezt elsősorban a magasabban gerjesztett kvartett állapotokba történő befogást követő, a metastabil  $1s2s2p^4P$  állapotba történő kaszkád legerjesztődési folyamatok okozzák. [4 (3) fő, 9,1 (0,1) MFt]

A hasonló szerkezetű víz- és  $H_2S$ -molekulák nagy töltésű ionokkal történő besugárzásánál az elektronbefogás és a molekula azt követő széttrésésének folyamatát vizsgálták. A kísérleteket a franciaországi Caenban az ún. ARIBE komplexum egyik kisenergiás ionnyalábjában végezték. Azt a meglepő eredményt kapták, hogy a két hasonló szerkezetű molekula esetén az egymásnak megfeleltethető „fragmentációs utak” jelentősen eltérő valószínűséggel valósultak meg. Hasonló eredményt kaptak a lövedéktöltésétől való függésre. Azonos molekulák esetében az azonos sebességű és azonos elektronszerkezetű, de kismértékben eltérő töltésű lövedékionokkal ( $N^{6+}$ ,  $O^{7+}$ ) való kölcsönhatásban az egyes fragmentációs csatornák relatív és abszolút valószínűségei is jelentősen eltérnek. Ez utóbbi jelenséget a jóval szimmetrikusabb metánmolekuláknál is tapasztalták. [5 (2) fő, 7,5 (0,5) MFt]

Elméletileg vizsgálták a  $C^{2+}$ -ionok és hidroxil gyökök ütközése során végbemenő töltéskicserélődési folyamatokat. Meghatározták az elektronátadási folyamat hatáskeresztmetszeteit egy olyan geometria elrendezésre, ahol a lövedék az OH tengely mentén haladt. Az O–H távolság függvényében meghatározott hatáskeresztmetszetek „szabályszerű” növekedést mutattak az O–H távolság csökkenésével. Ettől eltérő viselkedést csak az egyensúlyi távolságtól lényegesen kisebb tartományon találtak, amit a céltárgy igen gyors relaxációjaként lehet értelmezni. Ezen a tartományon a vibrációs effektusok is felerősödtek. [4 (1) fő, 3 (0) MFt]

Teljes kvantummechanikai és féllklasszikus leírással vizsgálták az elektronnal, protonnal és alfa-részecskékkel ütköző protonium annihilációját. Azt a folyamatot térképezték fel, hogy a protoniumban a magas pályaimpulzusnyomatékú kvantumszámmal jellemzett antiproton hogyan gerjesztődik le a 0 pályaimpulzusnyomatékú állapotba, ahol a proton közelébe kerülve azzal annihilálódik. Megállapították, hogy alacsony bombázó energiák esetén a dipólszerű ámenetek dominálnak, míg a nagy sebességek tartományán az elsőrendű Born-modell alkalmazható. A folyamat hatáskeresztmetszetét igen nagy ütközési energiatartományon vizsgálták, és a fő- valamint a mellékvantumszámok alapján skálázási szabályokat határoztak meg. [4 (1) fő, 9 (0) MFt]

Monokromatikus szinkrotronsugárzással Fe mintából keltett 1s fotoelektron-spektrumokat mértek, majd korrigálták azokban a fotoelektronok mintában történő szóródásának hatásait. A korrigált spektrumok alakja jól egyezik a Fe-atomokból álló klaszter esetében a Fermi-nívó környezetében kialakult lokális elektronállapot-sűrűsége és egyszerű statisztikai feltevéseken alapuló elméleti modell spektrumalakjával. Ez az eredmény azt is mutatja, hogy a kísérleti spektrumok interpretációjához ebben az esetben további (pl. shake-up) gerjesztések feltételezésére nincs szükség. [7 (5) fő, 13 (3) MFt]

Szilárdtestek felületéről visszaszóródott elektronok energiaveszteségi folyamatainak és spektrumának leírására Monte Carlo szimulációs modellt dolgoztak ki, elsőként alkalmazva pozíciófüggő differenciális rugalmatlan elektronszórási hatáskeresztmetszeteket (Li dielektromos válasz modelljén alapuló közelítésben). Cu minta és 500 eV-3000 eV energiájú primer elektronok esetében a szimuláció eredményeként kapott energiaveszteségi spektrumok jól egyeznek a nagy energiafelbontással mért kísérleti spektrumokkal, bizonyítva a kidolgozott modell érvényét. Mivel a modell képes elkülöníteni a mintán belüli tömbi és felületi gerjesztések hatásait, az egyszeres mintán belüli felületi és tömbi gerjesztések spektrális járulékaiknak az elemzésére is módot ad. [1 (1) fő, 4 (1) MFt]

A Si felületi rétegekből visszaszóródott elektronok felületi és tömbi plazmongerjesztések okozta energiaveszteségi folyamatainak lokális és nem lokális leírása közötti különbségek kvantitatív elemzését végezték el mind realisztikus, mind pedig egyenes vonalú („V-alakú”) elektrontrajektóriákat feltételezve. Az eredmények világosan mutatják, hogy az interferenciaeffektusok csak a felületi plazmonok gerjesztését befolyásolják jelentősen. 500 eV-nél nagyobb energiájú primer elektronok energiaveszteségi folyamatainak lokális leírásánál az interferenciaeffektusok elhanyagolásából eredő hiba kisebb, mint 6,2%. Ez egyúttal azt is jelenti, hogy lehetséges a teljes (rugalmas és rugalmatlan elektronszórási folyamatokat is magában foglaló) elektrontranszport Monte-Carlo-szimuláción alapuló modellezése az interferenciaeffektusok elhanyagolásából eredő jelentősebb hiba nélkül. [1 (1) fő, 3 (0) MFt]

Igen kis energiájú antiprotonok és He, valamint Ar atomok ütközésében elsőként sikerült kísérletileg meghatározni az egyszeres ionizációs hatáskeresztmetszeteket. Az antiproton energiája 3-tól 25 keV-es energiatartományba esett. [16 (1) fő, 1 (0) MFt]

Anatáz és rutil  $\text{TiO}_2$ -nanorészecskék elektronszerkezetét tanulmányozták a részecskék (klaszterek) méretének függvényében a klaszter molekulapálya (DV- $X\alpha$ ) modellel végzett számításaikkal. Elemezték a legalacsonyabban fekvő betöltetlen elektronállapotok sűrűségét, a tiltott energiasáv szélességének és a felületi hatásoknak a változását, valamint e változások lehetséges következményét az anatáz és a rutil részecskék kémiai aktivitására. [3 (3) fő, 5 (0) MFt]

### *Kvantummechanika*

Az egzaktul megoldható PT-szimmetrikus (egyidejű tér- és időtükrözéssel szemben invariáns) potenciálok vizsgálatát kiterjesztették szórási állapotokra is. Példaként a PT-szimmetrikus Coulomb-potenciált tekintették, amelynek kötött állapotait már korábban leírták, és amelyről kimutatták, hogy a valós x-tengelyen nem vezet normálható állapotokhoz, ezért a komplex x-

sík bizonyos trajektóriáin kell értelmezni. Egy U alakú trajektóriát tekintve meghatározták a reflexiós és transzmissziós együtthatókat. [3 (1) fő, 2,9 (0,4) MFT]

Kvantummechanikai rendszerek összefonódott állapotainak nemlokális tulajdonságait térképezték fel analitikusan és numerikus módszerek segítségével is. Nagyszámú éles Bell-egyenlőtlenségre sikerült meghatározni a kvantummechanikailag elérhető maximális sértést. Ezek között volt számos korábban nem ismert egyenlőtlenség is. A munka során nem csak azt mutatták meg, hogy két kimenetelű méréseket megengedve is vannak olyan Bell-egyenlőtlenségek, melyek maximális sértése csak kétdimenziósnál magasabb dimenziós részrendszerekből álló kvantumrendszerrel valósítható meg, hanem azt is, hogy semmilyen véges dimenziós kvantumrendszer nem elegendő mindegyik ilyen egyenlőtlenség maximális sértéséhez. Az eredmények hasznosak lehetnek kvantum-kriptográfiai alkalmazásokban, protokollok biztonságos voltának ellenőrzése során. [2 (2) fő, 15 (0) MFT]

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

A szigetelő kapillárisokban létrejövő ionterelődés mechanizmusát vizsgálták különböző laboratóriumokban és különböző kapillárismintákon. Debrecenben, az ATOMKI ECR ionforrásának nyalábján  $\text{Al}_2\text{O}_3$  anyagú nanokapilláris-mintákat mértek helyzetérzékeny MCP detektorral. A kapillárisokból kijövő 3 keV-es és 6 keV-es energiájú  $\text{Ne}^{6+}$  lövedékionok kétdimenziós szögeloszlásait vették fel 140 és 250 nm kapillárisátmérőjű 15000 nm vastag mintákon. Ezzel a módszerrel megmérték a 140 nm átmérőjű kapillárisminták ionterelő képességének energiafüggését is. A különböző töltésállapotú ionokat elektromos térrel szétválasztva azt tapasztalták, hogy az eredeti töltésállapotú ionok mellett az ionnyalábhöz képest dőlt kapillárisokból jelentős számú ultraibolya foton is kilép. Ez a jelenség felveti a kapillárisok új típusú alkalmazását ionok és felületek (pl. szerves molekulárétegek) kölcsönhatásainak vizsgálatában. Groningenben, a KVI Zernike-LEIF laboratóriumában pedig polietilén tereftalát kapillárismintákon vizsgálták az ionterelés kialakulásának dinamikáját, és megmutatták, hogyan épülnek fel egymást követően a kapillárisok belsejében az ionokat terelő töltésszigetek. [11 (5) fő, 22,2 (0,2) MFT]

Az intézet ECR Laboratóriuma, a Debreceni Egyetem Kísérleti Fizikai Tanszéke és Fogpótlástani Tanszéke közötti együttműködés keretében titán implantátumokat fedtek be vékony fullerén (C60) rétegekkel alacsony energiájú C60 nyalábbal történő besugárzás során. A kísérlet célja közbelső réteget képezni az élettelen (Ti) és az élő (csontsejt) anyagok között. A mintákon az első csontsejtnövesztések sikeresen megtörténtek. További szellemi és anyagi ráfordítás kívánatos, konkrét gazdasági haszon rövidtávú elérésére jó esély van. [6 (3) fő, 4,5 (1,5) MFT]

Részt vettek egy új típusú ECR-berendezés megtervezésében és üzembe helyezésében a Bio-Nano Electronics Research Center (Toyo University, Japán) számára. A berendezéssel új anyagokat (pl. fullerénbe zárt nitrogént, argont, vasat) szándékoznak előállítani a közeljövőben. A berendezés próbauzemelése 2008-ban sikeresen megtörténtek. További szellemi és anyagi ráfordítás kívánatos, jó esély van konkrét gazdasági haszon rövidtávú elérésére. [10 (1) fő, 2,5 (0,5) MFT]

Meghatározták több optikai jellemző szemcseméret-függését a  $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ ,  $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ ,  $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Cl}$ ,  $\text{SbSi}$  és  $(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x})_2\text{Se}_3$  anyagokból előállított nanokristályos porokra. [6 (1) fő, 2 (0) MFT]



Vékonyréteg-napelemek alapanyagául szolgáló In-rétegek tisztaságának ellenőrzésére a felületi rétegekben a szennyezők kémiai állapotát és mélységi koncentráció-eloszlását tanulmányozták ionporlasztásos röntgen-fotoelektronspektroszkópiai (XPS) módszerrel. A kapott információ az optimálisan működő rétegszerkezet kialakításához szükséges. Az eredmények hasznosításában érdekelt a KPE Kraft Project Elektronika Kft. [2 (2) fő, 1 (0) MFt]

Meghatározták LaSrCoO perovszkitvegyület-minták oxigénkoncentrációját annak érdekében, hogy a mintákon mágneses és elektromos transzport méréseket végezve információt nyerjenek az anyag elektromos vezetési mechanizmusának és mágneses tulajdonságaink Sr-tartalomfüggéséről. [4 (4) fő, 6 (0) MFt]

A mágneses nanorészecskék hipertermiás célú felhasználását célzó Jedlik Ányos pályázat keretében elvégezték a felhasznált nanomágneses anyagok mágneses tulajdonságainak minősítő vizsgálatát, kalorimetrikus úton megmérték a nanomágneses anyagokkal elérhető fűtőteljesítményt, és elméletileg megvizsgálták a fűtőteljesítményt meghatározó disszipációs mechanizmusokat. [2 (2) fő, 3 (0) MFt]

Nanométeres vastagságú mágneses/nem-mágneses vékonyfilm-szerkezetek SNMS-sel (szekunder semleges részecskéket felhasználó tömegspektrométerrel) történő vizsgálatával megállapították, hogy nanoméretben – sok más fizikai folyamathoz hasonlóan – az elektrokémiai leválasztási folyamatokról alkotott kép is módosul. [3 (2) fő, 11 (0) MFt]

SNMS-sel mért mélységi profilokból meghatározták az antimon diffúziós együtthatóját amorf szilícium vékonyrétegekben. Mivel az Sb széleskörűen használt adalékanyag a félvezetőiparban, az eredmény nemcsak tudományos, hanem félvezetőipari alkalmazások szempontjából is fontos. [3 (2) fő, 5 (0) MFt]

Hidrogénezett amorf Si/Ge rétegrendszer termikus stabilitását vizsgálva megmutatták, hogy a mintakészítés során beépülő hidrogén mennyiségének növelésével jelentősen csökken az a hőmérséklet, amit egy ilyen rendszer drasztikus szerkezeti változás nélkül el tud viselni. A napelemek egyik fejlesztési irányvonala az amorf hidrogénezett Si-rétegek alkalmazása, így a kapott eredmény ezen a téren is fontos információt jelent. [3 (1) fő, 1 (0) MFt]

Továbbfejlesztették az izotópszeparátor és alacsonyenergiás ionnyaláb-gyorsító berendezés ionforrását. A fejlesztések célja, hogy lehetővé váljon közepes olvadáspontú (1000-1300 °C) szilárd elemekből, elsősorban átmeneti fémekből előállított ionnyalábok alkalmazása. Emellett intenzív és stabil nyalábtranszport optimalizálását célul kitűző tesztméréseket is végeztek izotópkigyűjtési programok számára. A besugárzások és izotópkigyűjtés vezérelhető körülmények között való kivitelezése érdekében egy univerzális kigyűjtő kamrát is készítettek. [2 (2) fő, 15 (0) MFt]

#### *Detektálási és jelfeldolgozási technika*

Az elsősorban a kemény röntgen- és gamma-tartományban ( $\geq 50$  keV) perspektivikus CdTe detektorok spektruma jelalak-diszkriminációval történő javításának elvi határait vizsgálták. Mind analóg, mind digitális technikával kb. azonos, az irodalmi adatokhoz képest jobb energiafelbontást értek el. [2 (2) fő, 2,5 (0) MFt]

Nukleáris detektorként alkalmazott szilícium fotodiódák töltött részecskéktől elszenvedett sugárkárosodását vizsgálták. Időspektroszkópiai módszert dolgoztak ki, amely a töltött részecskék által a detektorban keltett töltések átlagos begyűjtési ideje (főleg a diffúziótól származó lassú komponens) eloszlásának meghatározására alkalmas. A módszerrel végzett mérések segítséget nyújtottak korábbi, energiaspektroszkópiával végzett töltésbegyűjtés- és feloldásmérési adataik értelmezéséhez. [2 (2) fő, 2,5 (0) MFt]

A PET-berendezésekben detektorként alkalmazandó szcintillációs kristályok minőségének jellemzésére korábban kidolgozott módszer alkalmazásához elkészítettek egy kis divergenciájú, nagy energiájú (511 vagy 662 keV) gamma-sugárnyaláb előállítására alkalmas kollimátort, továbbá megoldották ennek számítógép által vezérelt mozgatását. A kollimátor, valamint a korábban már kidolgozott adatgyűjtő egység segítségével lehetővé vált egybeépített szcintillációs kristálmátrixokban – azok megbontása nélkül – az egyedi kristályok minőséget jellemző paramétereinek meghatározása. [1 (1) fő, 7 (0) MFt]

Elkészítették a kisállat-PET újabb verzióját (miniPET-II), amely 12 modulból áll, modulonként 35x35 db LYSO szcintillátorkristály-érzékelőt tartalmaz. Kidolgozták a kristályok és a fotoelektronsokszorozó-kristályok összeépítésének tökéletesített technológiáját, valamint elkészítették a 12 detektormodult. A fejlesztés eredményét (kisállat- és humán-PET-berendezések) a Mediso Kft. (Bp.) fogja gyártásra előkészíteni. [9 (6) fő, 56 (16) MFt]

Megtervezték a TOF PET (Time Of Flight PET) detektormoduljának azt az elektronikai egységét, amely lehetővé teszi a detektormodulban levő fotoelektron-sokszorozók erősítéseinek és futásiidő-különbségeinek a kiegyenlítését. [4 (3) fő, 14 (4) MFt]

Elméletileg megvizsgálták egy három dimenzióban pozícióérzékeny folytonos szcintillációs kristályon alapuló szcintillációs gamma-detektor megvalósításának a lehetőségeit. Az eljárásra és az azt megvalósító elrendezésekre vonatkozóan szolgálati szabadalmat nyújtottak be. [3 (3) fő, 20 (0) MFt]

Kifejlesztettek egy laboratóriumi gyakorlatokra alkalmas spirál CT-t és egy-két detektorból álló mini PET-et, amelyeket a stockholmi műszaki egyetemen oktatási célokra használnak. [5 (5) fő, 5 (0) MFt]

### *Ionnyaláb-analitika*

A régió légköri aeroszolterhelését jelző adatbázisukat értékelve az aeroszol 10 µm-es és 2,5 µm-es mérettel jellemzett részecskéinek (PM10 és PM2.5) tömegeire, elemiszen-tartalmára (BC) és egyéb fontosabb elemi összetevőinek koncentrációjára vonatkozóan szezonális változásokat, tendenciákat állapítottak meg. Mintavételi kampányokat folytattak az aeroszol koncentráció gyors időbeli változásának nyomon követésére, valamint az aeroszol méreteloszlásának részletesebb meghatározására különböző évszakokban. [7 (5) fő, 31,3 (1,3) MFt]

Vízínövények gyökerében határozták meg az elemeloszlásokat. Megállapították, hogy a vizsgált mintákban a nehézfémek főleg a külső rétegben halmozódnak fel, gyakran vassal asszociálódva. [6 (3) fő, 5 (0) MFt]

„A Tisza és a Felső-Tisza-vidék hidroökológiája” c. NKTH-pályázatban elkezdett munka folytatásaként kontrollált etetéses kísérlet zajlott halak rézfelvételének vizsgálatára. Megállapították, hogy az akkumulálódott réz koncentrációja már rövid expozíciós idő (1 hét) alatt is jól kimutatható. [6 (2) fő, 4 (0) MFT]

Megállapították, hogy a fényvédő kozmetikumokban elterjedten használt TiO<sub>2</sub> nanopartikulumok in vivo nem jutnak át az ép bőrön. Az együttműködésben résztvevő fiziológusok vizsgálatai alapján azonban elmondható, hogy közvetlenül adagolva sejtkultúrákhoz, ezen nanopartikulumok szignifikáns hatással bírnak a sejtek különböző funkcióira. [6 (3) fő, 5,6 (1,6) MFT]

Az intézet pásztázó nukleáris mikroszondájánál új mérési elrendezést valósítottak meg az elasztikus előreszórás módszerének (ERDA) fókuszált ionnyalábbal való alkalmazására. Tudományos együttműködés keretében biológiai mintákon és polimereken végeztek analíziseket. A téma kapcsolódik a Hungarian Ion-beam Physics Platform együttműködéshez. [5 (3) fő, 16 (0) MFT]

A PADC (CR-39) szilárdtest-nyomdetektor mikromegmunkálás terén való alkalmazhatóságának vizsgálata során megállapították, hogy a polimer érzékenysége jelentősen növelhető CO<sub>2</sub>-kezeléssel. Ezáltal a besugárzáshoz szükséges gyorsítódő csökkenthető, s ez javítja a módszer hatékonyságát. Megállapították azt is, hogy a besugárzás előtt és azt követően a vákuumban eltöltött idő nem befolyásolta az előállítható struktúrák paramétereit, ami a PADC anyagot praktikusán használhatóvá minősíti. [3 (2) fő, 3,1 (0,1) MFT]

#### *Környezetanalitika és kormeghatározás*

Összefoglaló munkát készítettek a South Shetland Island (Antarktis) vulkáni tevékenységének fejlődéstörténetéről és szerkezeti sajátosságairól. [6 (1) fő, 2,4 (0,4) MFT]

A Tokaji hegységben komplex geokronológiai, vulkanológiai és geokémiai vizsgálatokat végeztek. [3 (1) fő, 3 (0,5) MFT]

Adatbázist készítettek a sziléziai harmadidőszaki bazalt vulkanizmus kutatásában az elmúlt évek során felhalmozódott koradatokról, valamint kiegészítették az új geokémiai adatokkal, amely egy nemzetközi folyóiratban közlésre kerülő összefoglaló munkának alapját képezi. [4 (1) fő, 1,3 (0,3) MFT]

A Bükkium területén megvizsgálták a kistokói metamorfózis intenzitását és a tektonikai folyamatokat az agyagásványok szemcseméretének függvényében. [3 (1) fő, 2,9 (0,4) MFT]

Kimutatták a Cadomi metamorfózist a variszkuszi metamorfitok amfiboljain a Cseh Masszívum területén. [5 (1) fő, 2,3 (0,3) MFT]

Fölfedezték, hogy a CR-39 típusú maratottnyom-részecskedetektor érzékenysége lényegesen megnő, ha a detektort maradás előtt forró vízben kezelik. A kezelés paramétereinek optimalizálásával új előhívási módszert dolgoztak ki, amelyet bevezettek a detektornak a radon-koncentráció mérésére való rutinszerű alkalmazásában is. [2 (1) fő, 3 (0) MFT]

A SzTE Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszékének munkatársaival közösen folytatott paleoklíma-kutatásaik során arra a felismerésre jutottak, hogy a jégkorszakot követő hőmérsékletemelkedés a Dél-Alföldön mintegy  $9,1 \pm 0,5^\circ\text{C}$  volt, szemben az Európára általában jellemző  $6 - 7,5^\circ\text{C}$  értékkel. A fenti eredmény eléréséhez nélkülözhetelen eszköz volt a 2008 elején elkészült hűtőrendszer. A berendezéssel a vízminták 8 K-re hűthetők, és a vízben oldott nemesgázok koncentrációja nagy pontossággal mérhető. A hűtő az Atomki és a heidelbergi Institute of Environmental Physics munkatársainak együttműködésével épült. [5 (3) fő, 4,8 (1,8) MFt]

Monitoring kutakba telepíthető automatikus vízmintázó berendezéseket, valamint a környezeti levegő trícium- és radiokarbon-tartalmának egyidejű mintázására alkalmas készülékeket fejlesztettek ki az Isotoptech Zrt-vel együttműködésben. A műszereket a Paksi Atomerőmű, a Püspökszilágyi Radioaktív Hulladék-Feldolgozó és -Tároló, valamint a 2008 augusztusában átadott Bátaapáti Nemzeti Radioaktív Hulladék-tároló területén és környezetében fogják használni. A vízmintázó készülék a radioaktív szennyezések mellett egyéb szennyezők, pl. nehézfémek nagy érzékenységgel kimutatására is alkalmas, így szennyvíztelepek, ipari létesítmények, hulladéktárolók talajvízszennyező hatásának, ivóvízbázisok állapotának folyamatos ellenőrzésére is használható. A levegő radiokarbon-tartalmát mintázó berendezés alkalmas lehet biomassza-erőművek felügyeletére is. [10 (3) fő, 4,2 (1,2) MFt]

Az előző bekezdésben említett levegőmintázó berendezést egy  $\text{CO}_2$ -koncentrációmérő berendezéssel összeépítették egy hordozható mini meteorológiai állomássá. A berendezés 2008 nyarától üzemel, lehetővé teszi nemcsak a levegő  $\text{CO}_2$ -tartalmának, hanem eredetének is folyamatos ellenőrzését. A mérési adatok alapján kiszámították, hogy a fűtési szezon beindulásával mintegy 17% fosszilis eredetű  $\text{CO}_2$  került a debreceni levegőbe. A mérések egy hosszú távú vizsgálatsorozat kezdetét jelentik. [2 (1) fő, 6,3 (4,8) MFt]

Fákban végbemenő nedváramlás vizsgálatára kifejlesztettek egy 4-csatornás termometriás mérőberendezést, és a Debreceni Egyetem Síkfőkút Project területén 3 példányát telepítették. Komplex terepi kísérleteket végeztek az azonos területen élő kocsánytalan (*Quercus petraea*) és cser (*Quercus cerris*) tölgyekkel és különböző hibrideikkel. A 2008-as tenyészidőszak nagy részét lefedő adatsort kaptak a meteorológiai és talajtani mennyiségekre, a nedváramlás intenzitására, a levélfiziológiai paraméterekre, valamint a törzsek növekedési ütemére. Az egyedülálló sokparaméteres adatbázis analízisétől új információk remélhetők a tölgyfajok és hibrideik klímaváltozásra adott válaszainak jobb megértéséhez. [7 (3) fő, 13 (3) MFt]

### *Radiokémia*

Kétféle, ioncserével és impregnálással előállított Ni-módosított MCM-41 mezopórusos szilikát katalitikus tulajdonságát tanulmányozták  $^{11}\text{C}$ -radioizotóppal jelzett metanol reagenssel. A metanolkonverzió-hozamok és -szelektivitások összehasonlítása alapján mindkét katalizátoron a fő termék a metán, szénmonoxid és a széndioxid, valamint a formaldehid volt. A dimetiléter csak az ioncserével előállított katalizátoron keletkezett, jelezvén annak savasabb karakterét. Az átalakulás hozama magasabb volt az impregnált módszerrel előállított katalizátoron. [3 (3) fő, 14,7 (1,7) MFt]

A  $^{68}\text{Ga}$  ( $T_{1/2}=67,6$  min) radioizotóp előállításának körülményeit vizsgálták természetes rézen végbemenő, alfa-részecskék által keltett magreakciók segítségével: hatáskeresztmetszet-adatokat mértek az  $E_{\alpha}<50$  MeV energiatarományban nemzetközi együttműködés keretében (NIRS, Japán), értékelték az irodalmi gerjesztésfüggvény-adatokat és hozamokat számoltak a  $^{68}\text{Ga}$  és a szennyező ( $^{66}\text{Ga}$ ,  $^{67}\text{Ga}$ ) izotópokra, vastagcél-tárgy-hozamokat mértek a termelés optimális paramétereinek meghatározására. A gallium radioizotópok réz célanyagból történő nagy hatékonyságú kiválasztási módszereinek vizsgálata is részét képezte a kísérleti munkának. [7 (3) fő, 16,7 (1,7) Mft]

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

#### *Hazai kutatási kapcsolatok*

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

- a részecske- és magfizika és alkalmazásai területén: az MTA RMKI, a Debreceni Egyetem (DE) Kísérleti Fizikai Tanszéke és Elméleti Fizikai Tanszéke, Növénytan Tanszéke, az MTA AEKI, a BME Nukleáris Technikai Intézete, a Szegedi TE, a DE Nukleáris Medicina Központja, NUKENRG Konzorcium;
- az atomfizika és alkalmazásai területén: a DE Kísérleti Fizikai Tanszéke, Szilárdtestfizikai Tanszéke, Alkalmazott Kémiai Tanszéke, Fizikai Kémia Tanszéke és Fogpótlástani Tanszéke, a BME Kísérleti Fizikai Tanszéke, a Miskolci Egyetem Fizikai Tanszéke, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, Alkaloida Kutató és Fejlesztő Kft., az MTA MFA és RMKI;
- a kondenzált rendszerek fizikájának területén: az MTA MFA, az MTA SZFKI, az MTA RMKI, az MTA SZTE Lézerfizikai Kutatócsoportja, a DE Szilárdtestfizikai Tanszéke és Fizikai Kémia Tanszéke, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, az ELTE Magkémiai Intézete, TKI Ferrit Kft, Kémiai Kutatóközpont, a Kraft Projekt Zrt., a Szegedi TE, a Paksi Atomerőmű Zrt.;
- a detektálási és jelfeldolgozási technika területén: a DE Nukleáris Medicina Központja, a Mediso Kft. (Budapest), a DE Kísérleti Fizikai Tanszéke;
- ionnyaláb-analítika területén: a DE több tanszéke és klinikája, az MTA MFA, az MTA SZFKI, az MTA RMKI, az MTA AEKI, az MTA Pannon Egyetemi Levegőkémiai Kutatócsoportja, a Szegedi TE Régészeti Tanszéke, az Országos Környezet-egészségügyi Intézet, az Országos Meteorológiai Szolgálat, DEOEC Bőrgyógyászati Klinika;
- környezetanalitika és kormeghatározás területén: a DE, az ELTE, Szegedi Tudományegyetem, és a Miskolci Egyetem több tanszéke, az MTA GKI, a MÁFI, az ELGI, az OKK-OSSKI, a VITUKI, a Paksi Atomerőmű Zrt., a püspökszilágyi RHKT Kht., a MECSEKÉRC Környezetvédelmi Zrt., MecsekÖKO Környezetvédelmi Zrt., MTA Régészeti Intézete, Magyar Nemzeti Múzeum, Budapesti Történeti Múzeum, Természettudományi Múzeum, Fácies Bt., Envicom 2000 Kft., Hydrosys Kft., Smaragd GSH Kft., Enviroinvest Kft., BME Nukleáris Technikai Intézete, ISOTOPTTECH Zrt., Országos Meteorológiai Szolgálat;
- a régészeti kutatások területén: a Magyar Nemzeti Múzeum és a hazai múzeumi hálózat több más intézménye;
- radiokémia területén: a DE Nukleáris Medicina Központja.

### *Részvétel a felsőoktatásban*

Az intézet 2008-ban megtartotta korábban is betöltött szerepét a felsőoktatásban, a Debreceni Egyetemen fenntartott hagyományos kapcsolatait. Az ATOMKI 30 kutatója a beszámolási időszakban meghirdetett 34 kurzus keretében 763 tantervi óra megtartásával járult hozzá a Debreceni Egyetemen (DE) folyó oktatáshoz. Két kutató a Szegedi Tudományegyetemen tartott egy 24 órás kurzust, egy kutató a BME-n egy kétórás előadást. A gyakorlati órák száma a DE-n 2008-ban 217 volt, amelyet 19 kutató részvételével tartottak. 3 kutató 15 órás szakmai továbbképzési gyakorlatot tartott 17 fiatal EU-beli nukleáris szakembernek. A pregraduális képzésben elsősorban fizikus, fizika tanári, informatikus, környezettan, környezettudományi, valamint környezetgazdálkodási agrármérnök szakos hallgatóknak oktattak (előadások, speciális laboratóriumi gyakorlatok, diplomamunkák). A beszámolási időszak folyamán 11 PhD-, 15 diplomamunkás és 6 TDK-hallgató dolgozott az intézetben, a témavezetésre fordított órák száma összesen 2126 volt.

Külön említést érdemel a Nukleáris képpalkotás című tárgy, melyet az intézet a Debreceni Egyetem Fizikai Intézetével és Informatikai Karával közösen hirdetett meg. Napjainkban a nukleáris fizika számos gyakorlati megoldását alkalmazzák az orvostudományban, a környezetvédelemben, az iparban és a mezőgazdaságban. Ezek között nagy jelentőséggel bírnak a különböző képpalkotó eljárások, amelyek segítségével élő szervezetek és élettelen tárgyak belsejébe tekinthetünk, és kaphatunk onnan számunkra fontos strukturális, vagy funkcionális információt. A kurzus célja, hogy áttekintést adjon ezen alkalmazások fizikai alapjairól és bemutassa azokat az elveket, módszereket és eszközöket, amelyek lehetővé teszik a gyakorlati alkalmazások megvalósítását.

Az oktatási tevékenység potenciális gyakorlati hatását egy másik példa is jellemzi. Nagyjelentőségű új felismerés, hogy a termőtalajba juttatott faszén többszörösére növelheti a terméshozamokat, és a talajba beépülő faszén évezredekig ott marad. Így a légkörben felhalmozódó széndioxid is kivonható, csökkentve a felmelegedést okozó üvegházhatást, továbbá felhasználhatjuk a mezőgazdasági hulladékok, melléktermékek faszéneseése közben felszabaduló energiát is. A nemzetközi szakirodalomban megjelenő ezen legújabb eredményekre Magyarországon az intézet egy kutatója hívta fel a gazdaság és talajtanász tudományos közvélemény figyelmét, a szaksajtóban ismertetve, az egyetemen nagyszámú hallgatónak tanítva és nyilvános előadásokon is terjesztve azokat.

A DE TTK kihelyezett Környezetfizikai Tanszéke helyileg az ATOMKI területén működik. A tanszék a csökkenő létszámú fizika szakos hallgatók mellett jelentős számú környezettan tanári, valamint környezettudomány szakos hallgató képzésében vesz részt.

### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az Atomki szervezte a Sugárkárosodás biomolekuláris rendszerekben című nemzetközi konferenciát (Debrecen, 2008. június 13-15.) és a Nemzetközi mikroszonda konferenciát (Debrecen, 2008. július 20-25.). A IV. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia (Debrecen, 2008. március 28-29.) és a Nemzetközi Vákuum Konferencia (Balatonalmádi, 2008. szeptember 22-26.) szervezőbizottságának elnöke atomkís kutató volt.

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

- a magfizika és alkalmazásai körében 22 ország kutatóhelyeivel 38 témában;
- az atomfizika és alkalmazásai területén 15 ország kutatóhelyeivel 32 témában;
- a detektálási és jelfeldolgozási technika területén 5 ország kutatóhelyeivel 6 témában;
- ionnyaláb-analitika területén 3 ország kutatóhelyeivel 4 témában;
- környezetanalitika és kormeghatározás területén 13 ország kutatóhelyeivel 17 témában.

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

Az Atomkiban 2008 folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma 21, az NKTH-pályázatiaké 17 volt.

A több intézményre kiterjedő nemzetközi programok közül az intézet 2 CERN-, 3 NAÜ-, 5 EU-projektumban, valamint nemzetközi összehasonlító programokban és gyakorlatokban (ESIR, VIRI, EURATOM, TRI-TOFFY, TRIC2008) vett részt.

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

A MTA által kötött egyezményeken alapuló kétoldalú együttműködési kapcsolatok 21 témában belga, bolgár, cseh, finn, japán, lengyel, mexikói, német, román, spanyol, valamint szerbiai kutatóintézetekkel és egyetemi kutatóhelyekkel folytatott együttműködésekre terjedtek ki.

Mind a TÉT egyezmények, mind az MTA által kötött nemzetközi megállapodások – az általuk biztosított többletforrások szintjétől függetlenül – jelentős mértékben járultak hozzá az intézet nemzetközi kapcsolatainak erősítéséhez. Egyes esetekben az együttműködés a főhatósági egyezmény nélkül teljes egészében megghiúsult volna. Az Atomki kutatói éppen ezért remélik, hogy az MTA-utaknál az utóbbi időben jelentkező problémákat sikerül megoldani.

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

1. Sohler D, Stanoiu M, Dombrádi Zs, Azaiez F, Brown BA, Saint-Laurent MG et al. (38), Elekes Z, Timár J: In-beam  $\gamma$  -ray spectroscopy of the neutron-rich nitrogen isotopes 19–22N. Phys. Rev. C 77, 044303 (2008)
2. Suzuki T, Rainovski G, Koike T, Ahn T, Carpenter MP, Costin A, et al. (18): Timár J. Lifetime measurement of candidate chiral doublet bands in the 103,104Rh isotopes with the recoil-distance Doppler-shift method in inverse kinematics. Phys. Rev. C 78, 031302(R) (2008)

3. Kiss GG, Rauscher T, Gyürky Gy, Simon A, Fülöp Zs, Somorjai E: Coulomb Suppression of the Stellar Enhancement Factor. Physical Review Letters 101, 191101-1 - 191101-4 (2008)
4. La Cognata M, Spitaleri C, Mukhamedzhanov AM, Irgaziev B, Tribble RE, Banu A, et al. (23), Kiss GG: Measurement of the 20 and 90 keV Resonances in the  $^{18}\text{O}(p,\alpha)^{15}\text{N}$  Reaction via the Trojan Horse Method. Physical Review Letters 101, 152501-1 - 152501-4 (2008)
5. Gibelin J, Beaumel D, Motobayashi T, Blumenfeld Y, Aoi N, Baba H, et al. (23), Elekes Z: Decay pattern of pygmy states observed in neutron-rich  $^{26}\text{Ne}$ . Physical Review Letters 101, 212503(4) (2008)
6. Lévai G: PT symmetry and its spontaneous breakdown in three dimensions. Journal of Physics A 41, 244015,(2008)
7. Id Betan R, Kruppa AT, Vertse T: Complex energy approach for calculating isobaric analogue states. Phys. Rev. C 78, 044308 (2008)
8. Somogyi G, Trócsányi Z: A subtraction scheme for computing QCD jet cross sections at NNLO: integrating the subtraction terms I. JHEP 0807:0509 (2008)
9. Vértesi T, Pál KF: Generalized Clauser-Horne-Shimony-Holt inequalities maximally violated by higher dimensional systems. Phys. Rev. A 77, 042106, 1-8 (2008)
10. Ditrói F, Takács S, Tárkányi F, Baba M, Corniani E, Shubin Yu N: Study of proton induced reactions on niobium targets up to 70 MeV. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 266, 5087 (2008)
11. Sarkadi-Pribóczki É, Tsoncheva T, Ivanova L: Desorption and catalytic study of iron modified MCM-41 silica by  $^{11}\text{C}$ -radiolabeled methanol. Catalysis Communications 9, 1932 (2008)
12. Nagatsu K, Fukumura T, Takei M, Szelecsényi F, Kovács Z, Suzuki K: Measurement of thick target yields of the  $\text{natS}(\text{Alpha},x)^{34}\text{mCl}$  nuclear reaction and estimation of its excitation function up to 70 MeV. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 266, 709 (2008)
13. Sarkadi L, Orbán A: Triple Coincidence Experiment to Explore the Two-Electron Continuum States of the Projectile Resulting from Mutual Ionization in 100-keV  $\text{He}^0+\text{He}$  Collisions. Phys. Rev. Lett. 100, 133201(4) (2008)
14. Kenéz L, Karácsony J, Derzsi A. Biri S: Theoretical model for study of the voltage-current curve of a Langmuir-probe used in the hot region of the ECR plasma. Physics Letters A 372, 4927-4931 (2008)
15. Bene E, Vibók Á, Halász GJ, Bacchus-Montabonel MC: Ab initio molecular treatment of Charge transfer processes induced by collision of  $\text{C}^{2+}$  ion with the OH radical: A linear approach. Chemical Physics Letter 455, 159 (2008)
16. Juhász Z, Sulik B, Biri S, Iván I, Tökési K, Fekete É, et al. (11), Pálinkás J. Ion guiding in alumina capillaries: MCP images of the transmitted ions, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 267, 321–325 (2009)



17. Stolterfoht N, Hellhammer R, Fink D, Sulik B, Juhász Z, Bodewits E, et al. (8): Dynamic properties of ion guiding through nanocapillaries in an insulating polymer, *Phys. Rev. A* 79, 022901 (2009)
18. Novák M. Monte Carlo simulation of energy loss of electrons backscattered from solid surfaces, *Surface Science* 602, 1458 (2008)
19. Novák M, Kövér L, Egri S, Cserny I, Tóth J, Varga D, Drube W: A simple statistical model for quantitative analysis of plasmon structures in XPS and Auger spectra of freeelectron-like materials. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 163, 7 (2008)
20. Borbély S, Tókési K, Nagy L: Ionization of the hydrogen atom by intense ultrashort laser pulses. *Phys. Rev. A* 77, 033412 (2008)
21. Kolesnikov VI, Gál J, Molnár J, et al. (101) (NA49 Collaboration), *Journal of Physics: Conference Series* 110, 3:2010 (2008)
22. Kertész Zs, Dobos E, Fenyős B, Kéki R, Borbély-Kiss I: Time and size resolved elemental component study of urban aerosol in Debrecen, Hungary. *X-Ray Spectrometry* 37, 107-110 (2008)
23. Kiss B, Bíró T, Czifra G, Tóth BI, Kertész Zs, Szikszai Z, et al. (9): Kiss ÁZ: Investigation of micronized titanium dioxide penetration in human skin xenografts and its effect on cellular functions of human skin-derived cells. *Experimental Dermatology* 17, 659-667 (2008)
24. Baradács E, Csige I, Rajta I: CO<sub>2</sub> treatment and vacuum effects in proton beam micromachining of PADC. *Radiation Measurements* 43, 1354-1356 (2008)
25. Bruni S, D'Orazio M, Haller MJ, Innocenti F, Manetti P, Pécskay Z, Tonarini S: Time-evolution of magma sources in a continental back-arc setting: the Cenozoic basalts from Sierra de San Bernardo (Patagonia, Chubut, Argentina). *Geological Magazine* 0 1-19 (2008)
26. Ulrych J, Dostal J, Hegner E, Balogh K, Ackerman L: Late Cretaceous to Paleocene melilitic rocks of the Ohre/Eger Rift in northern Bohemia, Czech Republic: Insights into the initial stages of continental rifting. *Lithos* 101, 141-161 (2008)
27. Aeschbach-Hertig W, El-Gamal H, Wieser M, Palcsu L: Modeling excess air and degassing in groundwater by equilibrium partitioning with a gas phase. *Water Resources Research* 44, W08:449 (2008)
28. Horváth T, Svingor É, Molnár M: New radiocarbon dates for the Baden culture. *Radiocarbon*, 50, 447-458 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Atommagkutató Intézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	196	Ebből kutató <sup>2</sup> :	95
PhD, kandidátus:	66	MTA doktora:	13
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	2
		rendes tag:	4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			249
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			217
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	126
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	18	idegen nyelven:	68
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	321,122	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	1780
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1780
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	3
		jegyzet:	1
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	4	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	58	posztterek száma <sup>10</sup> :	60
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	25	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			34
TDK-munkátkészítő hallgatók száma:	6	Diplomamunkát:	15
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	11
			1021
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			974,5 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	11	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	422,2 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			21
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	62,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázattémáinak száma:			17
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	26,9 MFt
Egyéb:	16	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	34 MFt
NFT-témákszám <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	155,8 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			13
EU-forrásból:	8	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	103,9 MFt
Egyéb:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3,1 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			44
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	36 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## FÖLDRAJZTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

1112 Budapest, Budaörsi út 45. 1388 Budapest, Pf. 64.

Telefon: 3092628, Fax: 3092690

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

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

A kutatóhely kiemelt tudományos feladata az ország természeti környezetében rövid és hosszú távon várható változások kutatása, a társadalmi-gazdasági térszerkezet átalakulási folyamatainak vizsgálata és a nemzet-, hon- illetve szomszédságismerethez kötődő földrajzi kutatások. Ezek egyaránt kapcsolódtak nemzetközi pályázatok során a tárgyévben (INCO, MTA–DFG), ill. korábban elnyert kutatási projektekhez (SEFONE, EU-LIFE SOWAP, EU-6 BORASSUS, INTERREG III/B - URGE, ACRE, UNESCO-MOST stb.), valamint a hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez (OTKA, OFA stb.). Kiemelt feladat volt a Magyarország mai területére vonatkozó etnikai viszonyok változását 1495-től 2001-ig bemutató térképsorozat elkészítése, valamint az interdiszciplináris együttműködésben készülő „Hungary in Maps” tematikus atlaszmű tartalmi előkészítése.

2008-ban feladat volt: a Duna menti táj geomorfológiai kutatása során, a folyómenti tömegmozgások, különösen a földcsuszamlások és a tektonikai folyamatok hatásának felmérése. Ennek során vizsgálni kellett a szerkezeti–tektonikai tényezőket, litosztratigráfiai jellegzetességeket és a mindenkori víz-, ill. völgyhálózat fejlődésének irányítottságát, az erózióbázisok és a meder-irányváltások összefüggései tekintetében.

A kutatási feladatok között szerepelt a globális klíma- és ökoszféra-változás kutatása, ennek keretében a késő kainozoikum üledékvizsgálata, továbbá a dombsági és hegyláb felszíni kutatások folytatása. Kiemelt feladat volt annak vizsgálata, hogy a mélytengeri üledékek hideg és meleg klímaszakasz ciklusainak milyen hatása van a szárazföldi ősföldrajzi és őshajlati környezetre. Külön feladat volt a hideg–meleg mélytengeri klímaszakaszok alsó határának a szárazföldi üledékekben való kimutatása, valamint annak felderítése, hogy mely szárazföldi üledékekben figyelhetők meg a késő kainozoikumi eljegesedések hatásai.

Az intézet a „Nemzeti Radioaktív Hulladék-tároló (NRHT), hagyományos környezeti monitoring program” keretében a Hutai-patak környezetében bekövetkezett környezeti változások követését, valamint az azt kiváltó okok feltárását; az NRHT építése által megnövekedett közlekedési eredetű környezetterhelés követését és; a terület eróziós folyamatainak megfigyelését végezte el. Feladat volt a Radioaktív Hulladék Feldolgozó Tároló környezetében a csapadékvíz felszíni rétegekbe történő beszivárgásának követése, valamint az eróziós folyamatok figyelemmel kísérése.

Az intézet természetföldrajzi kutatásainak további fő feladatait az alábbi kutatási programok önálló, ill. együttműködésben való művelése jelentette: Az EU-6 BORASSUS projekt keretében a „Geotextíliák talajerózióra gyakorolt hatásának vizsgálata szőlőben és gyümölcsösben” c. projekt; A SOWAP keretében folyó, Syngenta által támogatott „Talaj- és felszíni vízvédelem minimum talajművelés alkalmazásával Észak- és Közép-Európában” c.

projekt; „Táji mintázatok hatása a talaj oxidációs viszonyainak és kémhatásának mozaikosságára” c. projekt, valamint „Az erubáz talajok természetföldrajzi vizsgálata” c. MTA FKI–FVM–ELTE közös projekt.

Az alap kutatások keretében 2008-ban is a kiemelt feladatok között szerepelt a tárgyévben futó 6, és egy induló új OTKA téma művelése (Negyedidőszaki üledékek korrelációja; Magyarország etnikai földrajza és recens etnikai folyamatok a szomszédos országokban; Egészségturizmus és életminőség Magyarországon; A modern magyar ipar térszerkezeti összefüggései; A városrehabilitációs programok hatása a nagyvárosi népesség életminőségére, valamint új témaként a „Spatial structural impacts of industrial investments and their transport connections”). Közülük 2 egy éves halasztás után záródott 2008-ban.

További fontos cél volt a több éves EU-s keretprogramhoz kapcsolódó nemzetközi pályázaton elnyert kutatási feladatok időarányos teljesítése. Többek között: a városi zöldterületek rehabilitációját szolgáló URGE projekt (INTERREG III/B), „A kreatív tudásszint növelésének szerepe az európai nagyvárosi régiók versenyképességének javításában” c. ACRE projekt (Amszterdami Egyetemen közös kutatás), az EU-6 keretprogram 7. prioritásába tartozó SeFoNe (Searching for Neighbours: dynamics of physical and mental borders in the New Europe”), az MTA–DFG közös finanszírozásban futó „Revitalisierung von gründerzeitlichen Altbauwohnquartieren in Budapest – Prozesse, Strategien, Perspektiven” c. projekt. Új DFG projektként indult „Zwischen Gentrification und Abwärtsspirale” című kutatás, továbbá elkezdődtek a „Hungary in Maps” tematikus angol nyelvű atlaszmű munkálatai. Fontos feladat volt a „Magyarország kistájkatasztere” c. 800 oldalas szakkiadvány kiadásra való előkészítése a szöveges részek javításával és a térképanyaggal kapcsolatos korrekciók elvégzésével.

Kiemelt feladat volt a tárgyévben a Nemzetközi Földrajzi Unió (IGU) 31. Kongresszusára (Tunisz, 2008 aug.) való felkészülés, valamint az International Soil Conservation Organization (ISCO) 15. Kongresszusának (Budapest) megszervezése. Az IGU kongresszus tiszteletére az intézet legjelentősebb kutatási eredményeit a Studies in Geography in Hungary sorozat 33. köteteként publikálták (2008 július).

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

### *Globális klímaváltozások és löszkutatás*

A vizsgált közép-európai, Kárpát-medencebeli lösz, és őstalaj sorozatok kutatási eredményei egyértelműen igazolják az utóbbi 3 millió év klímaváltozásával kapcsolatos feltételezéseiket. A kontinentális üledéksorok és az óceáni üledékek paleogeográfiai változásai hasonló értékeket mutatva, azonos klímaváltozások eredményeinek tekinthetők. Mindkettőben ugyanannyi oszcilláció mutatkozik és párhuzamosság figyelhető a két üledéksorozat kronológiája között is. Mindkettőben megtalálható a ciklikusság, és a glaciális képződmények száma is mindkét esetben ugyanaz.

Az éghajlat- és ökoszféra változások a különböző szelvények üledékvizsgálatai alapján kimutathatók. A legteljesebb üledéksorokat a kremsi- és a červený kopec-i feltárás képviseli. A

rétegek a mintegy 3 millió évvel ezelőtt elkezdődött utolsó nagy lehülési időszak eljegesedési (glaciális) és felmelegedési (interglaciális) periódusait, valamint az azokon belüli változásokat (hideg- és melegmaximumokat) képviselik. Vizsgálataikkal pontosan el tudták határolni a rétegeket, meg tudták mondani, hogy az adott réteg milyen magasságában következett be a hőmérsékleti maximum, ill. minimum. Következtetni tudtak az ősdomborzatra, az őséghajlatra, az adott szélirányokra, valamint az adott üledék származási helyére, szállítási jellegére, az üledék helyben képződött, vagy áttelepített voltára, az esetleges üledékhiátusokra.

*A kutatásban résztvevők száma: 4 fő, ebből intézeti: 4 fő.*

*Becsült intézeti ráfordítás 2,0 MFt, ebből pályázati forrás: 1,2 MFt.*

*Az eredmény hasznosíthatósága.* Az újszerű eredményeket mind a magyar, mind a külföldi globális éghajlatváltozással foglalkozó kutatók és oktatók is használni tudják.

#### *A Duna menti táj geomorfológiai kutatása*

A vizsgálatok során a folyó hazai 410 km-es szakaszára körültekintő elemzést és értékelést készítettek. Vizsgálták a szerkezeti–tektonikai tényezőket, litosztratigráfiai jellegzetességeket és a mindenkor vízföldet, ill. völgyhálózat fejlődésének–irányítottságát, az erózióbázisok és a meder-irányváltások összefüggései tekintetében. A téma aktualitását hangsúlyozza, hogy a magaspart domborzati adottságai hatással vannak a közlekedési és hajózási útvonalak, létesítmények, a települések fejlesztési lehetőségeire, pl. Dunaszekcső, Paks, Dunaújváros és más számos magasparttal rendelkező településen.

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

*Becsült intézeti ráfordítás: 1,5 MFt, ebből pályázati forrás: 0 MFt*

*Eredmény hasznosíthatósága:* Az évről-évre bekövetkező károk elhárítása jelentős költségterhet jelent az önkormányzatoknak, a vonalas létesítmények (elektromos vezetékek, csatornák, vasutak stb.) üzemeltetőinek, összességében a károk a nemzetgazdaság költségvetését terhelik. A 2007–2008. évi dunaszekcsői partmozgások, a Dunaújváros római castrum melletti mozgások, a rácalmás-ófalui mozgások, az M 10-es út Sánc-hegy melletti vizsgálataink és felszindinamikai kutatásainak eredményei közvetlenül hasznosultak az önkormányzatok partfal-rehabilitációs munkáiban.

#### *Tiszazug és a Hármas-Körös hullámtér-feltöltődés vizsgálata*

A Tiszazug területén a Hármas-Körös alsó 5 km-es torkolati szakaszán vizsgálták a hullámtéren gyarapodó folyóvízi hordalékot, az árvizek alkalmával jelentkező a középvízi mederből kilépő víz övzátóny építő hatását, az árvizek és az árvízvédelmi töltések kölcsönhatását, valamint a 2006-os Szelevény melletti rézsúcsuszás szelvényében kialakult katasztrófális árvízi körülményeket. A Körösök partján az árvízvédelemmel összefüggő geomorfológiai kutatások olyan megoldottként vélt problémákat is felvetnek, amelyek az árvédelmi töltések rézsúállékonyságával is kapcsolatosak.

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

*Becsült intézeti ráfordítás: 7,6 MFt, ebből pályázati forrás: 0 MFt*

*Eredmény hasznosíthatósága:* A Szelevény melletti árvédelmi töltések vizsgálatai rávilágítottak arra, hogy a folyamatos gátmagasítások következtében a rézsúk kialakításuk függvényében csuszásra hajlamosak. A árvízi események hatására megkezdett geomorfológiai kutatások a nagy árvízi terhelések következtében veszélyeztetett árvédelmi töltésszakaszok feltárását segítik a Körösök és a Tisza hullámterén.

A SOWAP keretében folyó, a tájdegradáció alakulását vizsgáló projekt során kimutatták, hogy Magyarország területén a legfontosabb tájdegradációs folyamat a talajerózió. A lineáris erózió domborzatformáló szerepét a Balaton vízgyűjtőn és dombsági területeken (Baranya, Nógrád) vizsgálták. Ennek során Cézium 137 izotóp módszerrel igazolták, hogy a vízgyűjtőről lepusztult talaj és laza üledékes kőzet, döntően a lineáris (árkos) erózió tevékenységének eredménye. Megállapították, hogy bár az árkos erózió kialakulása speciális természetföldrajzi körülményekhez – ezen belül is főként a kőzetminőséghez – kötődik, a döntő szerepet mégis az emberi behatás – *a mismanagement* – játssza.

*Kutatásban résztvevők száma: 10 fő, ebből intézeti: 6 fő*

*Becsült intézeti ráfordítás: 27 MFt, ebből pályázati forrás: 27 MFt*

*Eredmény hasznosíthatósága:* A tájdegradációt előidéző komplex természeti és antropogén hatások mélyebb megismerése nagymértékben elősegíti a tájvédelem hatékonyságának növelését.

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

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

*Becsült intézeti ráfordítás: 12 MFt, ebből pályázati forrás: 12 MFt*

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

„Searching for neighbours: dynamics of physical and mental borders in the New Europe” (SEFONE) c. EU-projekt keretében vizsgálták a Schengeni határőrizeti és vízumrendszer fogadtatását, és hatásait a magyar–ukrán–román határvidéki, illetve interetnikus viszonyokra. Ukrán–magyar viszonylatban kimutatták, hogy a megváltozott határátkelési helyzetben a sokszor létfenntartást szolgáló gazdasági jellegű határforgalom nehezebbé vált, mely kiegészülve a korábban jól fizető magyarországi alkalmi munkavállalás kereteinek beszűkülésével a kárpátaljai határvidéki népesség jelentős része életstratégiájának – belső-ukrán területek felé orientálódó – váltására kényszerült. A román–magyar határszakasz mentén egyrészt feltárták a magyar–román–cigány együttélés, a különböző etnikumok (főként nagyváradi) térhasználatának sajátosságait. Különös hangsúlyt kapott még a szimbolikus etnikai térfoglalás és a mentális terek kutatása is (Bővebben: [www.sefone.soton.ac.uk](http://www.sefone.soton.ac.uk)).

*Kutatásban résztvevők száma: 18 fő, ebből intézeti: 3 fő*

*Becsült intézeti ráfordítás: 70 MFt, ebből pályázati forrás: 70 MFt*

*Eredmény hasznosíthatósága:* A kutatás eredményei nagyban elősegítik magyar–ukrán–román viszonylatban a határ menti térségek gazdasági fejlődését, interetnikus kapcsolatainak szélesedését és az etnikai feszültségek oldását.

Az „Egészségturizmus és életminőség Magyarországon” c. OTKA-kutatás során feltárták az egészségturizmus főbb társadalmi gazdasági hatásait. Megállapították, hogy a rendkívül erős kínálat és a vele összefüggő marketingkommunikáció nincs összhangban a belföldi kereslet volumenével. A gyógyfürdővel rendelkező településeknél kimutatták, hogy a támogatások nem segítették elő a keresletélénkülést. Megindult az egészségpénztárak turisztikai

vonatkozásainak értékelése, valamint 48, gyógyfürdővel rendelkező településen a fürdő és a helyi lakosság kapcsolatának feltárása.

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

*Becsült intézeti ráfordítás: 2,5 MFt, ebből pályázati forrás: 2,5 MFt*

*Eredmény hasznosíthatósága:* A kutatás eredményei elősegítik gyógyfürdőink hatékonyabb hasznosítását és hozzájárulnak az egészségturizmus további térnyeréséhez.

- *A püspökszilágyi RHFT-hez* kapcsolódó környezetbiztonsági és földtani kutatások során 2008-ban is kiterjedt környezet monitoring tevékenységet végeztek, emellett talajeróziós vizsgálatokat folytattak a veszélyes hulladék-lerakóhely szűkebb környezetére vonatkozóan.
- *„Magyarország kistáj-katasztere I-II”* c. szakkönyv kibővítéséhez kapcsolódóan több mint 200 tematikus térképet készítettek, amely révén a hazai tájföldrajzi témájú térképállomány egyedülálló mértékben gazdagodott. A kistáj-elemzésekhez kapcsolódó, tekintélyes mennyiségű kartográfiai anyag széleskörűen tükrözi az egyes hazai kistájakat az utóbbi közel két évtizedben ért természet- és társadalomföldrajzi változásokat.
- Folytatódott az Aquincum római kori környezetének rekonstrukcióját célzó kutatás óbudai római kori települések környezetgeomorfológiai szempontú vizsgálatával, az Aquincumi Múzeummal való együttműködés keretében.
- Intézeti kezdeményezéssel folytatódtak az eddig is jelentős hazai és nemzetközi érdeklődést keltő geomorfológiai vizsgálat-sorozatok a Mars bolygó felszínén lejátszódott felszínfejlődési folyamatok tanulmányozására a NASA-tól kapott újabb fotó-dokumentációs anyag kiértékelésével, több bizonyítékot is találva arra, hogy a víz egykori jelen volt a bolygó felszínén.

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

A Kutatóintézet 2008-ban is széles körű együttműködést folytatott az MTA földtudományi intézeteivel, emellett az MTA egyéb rokontudományi intézetei közül az Regionális Kutatások Központjával, az Etnikai-nemzeti Kisebbségkutató Intézettel, a Történettudományi Intézettel, a TAKI-val, a Szociológiai Kutatóintézettel, valamint különféle szaktárcák kutatóhelyeivel (KVM, FM, OMSZ, KTI, stb.).

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

Tudományos kutatóik 2008-ban is szerteágazó felsőoktatási tevékenységet folytattak. Számos felsőoktatási intézményben végeztek oktatási tevékenységet félállású oktatóként, ill. óraadóként. A legszorosabb kapcsolata az intézet kutatóinak az egyetemekkel volt (ELTE, ME, PTE, SZTE, NYME, Budapesti Corvinus Egyetem, Andrássy Német Nyelvű Egyetem, Selye János Egyetem, CEU, VE), de a főiskolák (BBE, KJF, BGF, KVIF) geográfus, ill. terület- és településfejlesztő szakember képzésében is tevékenyen részt vettek. 2008-ban munkatársaik közül 12-en folytattak felsőoktatási tevékenységet.

2008-ban is aktív oktatási tevékenység folyt az ELTE-nek az intézethez kihelyezett Alkalmazott Földrajzi Tanszéki Csoportjában, amelynek több mint egy évtizede ad otthont az FKI. A beszámolási évben 9 kutatójuk kapcsolódott be a hazai geográfus hallgatók PhD képzésébe, ill. egyetemi diplomamunkák irányításába. 10 kutató véleményezett felsőoktatási és akadémiai pályázati munkákat, PhD dolgozatokat, diplomamunkákat. 4 fiatal kutató (MTA álláshelyen) végzi az ELTE, ill. a PTE doktori iskoláját. Az intézet igazgatója a Szent István Akadémia rendes tagja. Egy tudományos tanácsadójuk 2007 óta az ISCO elnöke, valamint az ESSC alelnöke, egy pedig a HUNGEO elnöke. Egy tudományos tanácsadójuk az MTA Földrajzi I. Tudományos Bizottságának alelnöki feladatait látta el.

A beszámolási évben 12 kutatójuk összesen 57 előadást tartott, ebből 29-et nemzetközi tudományos rendezvényeken. A hazai tudományos események közül kiemelkednek a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának februári akadémiai beszámoló ülésén, a X. Osztály májusi ülésén, az ISCO budapesti konferenciáján, a IV. Magyar Földrajzi Konferencián (Debrecen, nov.), a IX. HUNGEO Konferencián (Budapest, aug.), továbbá a novemberi Intézeti Tudományos Napon rendezett konferencián elhangzott előadások.

Az intézet 2008-ban is kiemelt figyelmet fordított meglévő sokoldalú nemzetközi kapcsolatainak ápolására és bővítésére. Ennek keretében törekedett minél több EU projektbe (köztük az EU-6 keretprogramba) való bekapcsolódásra és a nemzetközi pályázatokon való sikeres szereplésre, kihasználva kutatógárdája széles nemzetközi kapcsolatait. Egy főmunkatársuk a szlovákiai Selye János Egyetemen, egy pedig a kolozsvári Babes-Bolyai Egyetemen lát el felsőoktatási feladatokat.

A beszámolási év tudományos szakmai rendezvényei közül kiemelkedik az intézet által szervezett International Soil Conservation Organization (ISCO) 15. Kongresszusa (Budapest, szept.). Ugyancsak az intézetben rendezték meg 2008-ban a Szilárd Jenő születésének 85. évfordulójára szervezett tudományos konferenciát (FKI, Budapest, nov).

A külföldi tudományos rendezvények közül az intézet kutatói a következőkön szerepeltek előadással, poszterekkel, korreferátumokkal, ill. konzulensként: IGU 31th Congress (Tunis, Tunézia), BORASSUS Sustainable Development Conference (Vilnius, Litvánia) és a projekt éves munkaértekezlete (Saigon, Vietnám), COST Soil and Hillslope Management Conference (Aveiro, Portugália), EFC 26th Conference on Desertification (Oulu, Finnország), EAPS Int Conference (Barcelona), ACRE Symposium (Riga, Lettország), GreenKeys Workshop (Szófia), Annual Conference, Institute of British Geographers (London), UN-HABITAT Conference (Sevilla) Symposium on Tourism (Bolzano, Olaszország), a Norvég Földrajzi Társaság konferenciája (Trondheim, Norvégia), Horvát-magyar Földrajzi Szeminárium (Mostar, Horvátország), SeFoNe Workshop (Chemnitz, Bayreuth, Nicosia, Catania).

2008-ban az intézet nemzetközi kapcsolatai különösen szorosak voltak a Román, az Ukrán, az Osztrák, valamint a Szlovák Tudományos Akadémiák Földrajzi Intézeteivel, a németországi Institut für Länderkunde-val, (Lipcse), a kijevi Sevcsenko Egyetemen, a hannoveri Akademie für Raumordnung und Landesplanung-gal továbbá az ungvári, a nagyváradi, a zágrábi, a lipcsei, a kolozsvári, a berni, és a berlini, újvidéki egyetemekkel, valamint a beregszászi főiskolával. E kapcsolatok számos vonatkozásban kötődnek az említett nemzetközi együttműködésben folyó kutatásokhoz, ill. különféle kétoldalú tudományos



együttműködésekhez. 2008-ban is bővültek az intézet nemzetközi kapcsolatai a bolzanói és a kanpuri (India) egyetemekkel.

2008-ban is fogadtak külföldi kutatókat, akiknek magyarországi szakmai programját szervezték elsősorban Romániából, Szlovákiából, Svájcban, Ausztriából, Olaszországból, valamint a Kárpát-medence felsőoktatási intézményeiből (Újvidék, Belgrád, Nagyvárad, Kolozsvár, Zágráb, Beregszász).

Munkatársaik közül 6-an vesznek részt hosszabb ideje bizottsági tagként nemzetközi tudományos szervezetek munkájában, 5 fő nemzetközi földrajzi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja. A Természetföldrajzi Osztály vezetője az ESSC alelnöke, egyben az IGU Magyar Nemzeti Bizottságának elnöke. Az intézet igazgatója az INQUA Magyar Tagozatának volt elnöke. Egy senior kutatójuk Bolyai-ösztöndíjas. Az intézet kutatóinak idegen nyelvű tanulmányai 10 külföldi szakfolyóiratban és számos konferencia kiadványban jelentek meg.

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

2008-ban egy OTKA-pályázatot („Spatial structural impacts of industrial investments and their transport connections”) nyertek el. A korábban elnyert hazai pályázatok között jelentős arányban voltak jelen 2008-ban is az OTKA-pályázatok (a művelt témák száma: 5).

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

Ugyancsak folytatódott 2008-ban az INTERREG III/B CADSES keretében folyó GreenKeys projekt, amely a nagyvárosok zöldterület növelését célozza. Megjelentették a kritérium-katalógust (ICC – Interdisciplinary Catalogue of Criteria), és az ehhez kapcsolódó monitoring rendszer végleges változatát.

Elvégezték a 2007-ben indított, MTA-DFG koordináción alapuló „Zwischen Gentrification und Abwärtsspirale” c. kétéves projekt időarányos kutatásait az Institut für Länderkunde közreműködésével, amelynek keretében 5 közép-európai nagyváros (Budapest, Lipcse, Vilnius, Szófia, Szentpétervár) különböző fizikai állapotú és környezetű lakónegyedeinek összehasonlító vizsgálata történt meg a hatékony városrész-rehabilitációs eljárások kidolgozásának tudományos megalapozása céljából.

Egy tudományos tanácsadójuk aktív munkát végez az UNESCO MOST-programjában, amely a történelmi belvárosok kedvező társadalmi szerkezetének megőrizhetőségét szolgálja.

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

1. Alföldi Gy, Kovács Z. (szerk.): Városi zöld könyv: kulcs a fenntartható városhoz / szerk. Alföldi Gy, Kovács Z: – Budapest: Építésügyi Tájékoztatási Központ; MTA FKI; Rév8 Józsefvárosi Rehabilitációs és Városfejlesztési Zrt., – 195 (2008)

2. Dövényi Z, Karácsonyi D: A munkanélküliség és a jövedelmek területi különbségei Ukrajnában/Dövényi Z, Karácsonyi D. 2008. Tér és Társadalom, 22/4. 159-188 (2008)
3. Egedy T, Balogi A, Földi Zs, Kovács Z: Main drivers for settlement of creative and knowledge intensive companies in the Budapest Metropolitan Region : the managers' view /Tamás Egedy [et al.]. – Amsterdam : AMIDSt, University of Amsterdam, – 80, 24 cm. – (ACRE report ; 6.4.) (2008)
4. Illés S, Michalkó G: The relationships between international tourism and migration in Hungary: tourism flows and foreign property ownership. Tourism Geographies 10:(1) 98-118 (2008)
5. Kertész Á: Tájdegradáció és elsivatagosodás / Kertész Ádám, 2008. Magyar Tudomány, 169/6. 715-724 (2008)
6. Kertész Á, Kovács Z, (eds.): Dimensions and trends in Hungarian geography : dedicated to the 31st International Geographical Congress, Tunis, 12-15 August 2008 / ed. by Á, Kertész and Z, Kovács. – Budapest : Geographical Research Institute of H.A.S., – 240, 24 cm. – (Studies in geography in Hungary ; 33.) (2008)
7. Kiss É: The impacts of relocation on the spatial pattern to Hungarian industry = A relokáció hatásai a magyar ipar területi szerkezetére (címfordítás) / Eva Kiss, Geographia Polonica, 80. 2007/1. 43-61 (2007)
8. Kocsis K, Rudenko L, Schweitzer F: Ukraine in maps / ed. by K, Kocsis, L, Rudenko, F, Schweitzer. – Kyiv ; Budapest : Institute of Geography, National Academy of Sciences of Ukraine; Geographical Research Institute of H.A.S.,– 147 (2008)
9. Kocsis K: Changing ethnic patterns in Transylvania since 1989/K, Kocsis – Budapest: Akadémiai Kiadó, 2007. Hungarian Studies, 21. 1-2. 181-203 (2007)
10. Kovács Z: Social sustainability of historic districts: the East-Central European experience. In: Yuan Y, Wei C, Calza C, Romero R W (eds.): Balanced Urban Revitalization. Paris: UNESCO, (2008) 55-72. (Human Settlements and Socio-Cultural Environment ; 60.)
11. Schweitzer F: Ismét a tiszai árvizekről / Schweitzer F, – Pécs: MTA RKK, (2008) A fenntartható fejlődés és a megújuló természeti erőforrások környezetvédelmi összefüggései a Kárpát-medencében : konferenciakötet / szerk. Fodor István, Suvák A. – 47-60
12. Schweitzer F, Bérci K, Balogh J, (szerk.): A Bábaapátiban épülő Nemzeti Radioaktív hulladék-tároló környezetföldrajzi vizsgálata / szerk. Schweitzer Ferenc, Bérci Károly, Balogh János. – Budapest : MTA FKI, (2008) – 214 p.: – (Elmélet - módszer – gyakorlat ; 63.)
13. Schweitzer F, Balogh J, Kis É: Hullámterek vizsgálata a Dél-Alföldön, (2008) Földrajzi Értesítő, 57. 111-123 (2008/1-2.)
14. Szalai Z, Németh T: Elemi táji mintázatok hatása talajkémiai paraméterekre = Influence of elementary land mosaics on chemical parameters of soils (címfordítás) / Szalai Zoltán, Németh Tibor, 2008. Földrajzi Értesítő, 57. 2008/1-2. 135-146.
15. Tiner T: A mobiltelefonok elterjedése az Ormánság néhány törpefalvában = Spatial diffusion of mobile phones in some dwarf villages of the Ormánság microregion, south-west Hungary (címfordítás) / Tiner Tibor, 2008. Földrajzi Értesítő, 57. 2008/1-2. 213-227.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Földrajztudományi Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	46	Ebből kutató <sup>2</sup> :	22
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	5
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			148
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			137
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	0
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	20	idegen nyelven:	10
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	0	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	315
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			315
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	1	könyvfejezet:	24
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	4	könyvfejezet:	12
		jegyzet:	1
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	29	posztterek száma <sup>10</sup> :	15
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			11
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	47
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	12
			430
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			188,9 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	4	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	69,8 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			5
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,9 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			6
EU-forrásból:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18,4 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			8
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	24,7 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## GEODÉZIAI ÉS GEOFIZIKAI KUTATÓINTÉZET

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

Telefon:99-508350, Fax:99-508355

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

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

A fő feladatokat 2008-ban is geodéziai, geofizikai és szeizmológiai alapkutatások, az ezekhez szorosan kapcsolódó terepi és laboratóriumi munkák, a megfigyelési adatok tudományos feldolgozása, értelmezése és közzététele jelentették. Az intézet elméleti és gyakorlati módszerfejlesztéseket végzett, működtette az országos szeizmológiai hálózatot és ügyeletet, valamint a geo-elektromágneses és a geodinamikai obszervatóriumot.

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

#### *Geodéziai Főosztály*

*Obszervatóriumi és terepi geodinamikai megfigyelések, a megfigyelések technikájának és metodikájának fejlesztése (A kutatásokban 5 kutató és 2 mérnök vett részt, a rendelkezésre álló pénzkeret 36 millió forint volt, melynek 10%-a pályázati forrásokból származott.) A kutatás hozzájárul a természeti katasztrófák megelőzéséhez.*

A Sopronbánfalvi Geodinamikai Obszervatóriumban új, folyamatos regisztrálású radon mérő műszert helyeztek üzembe a kőzetfeszültség és a kibocsátott radon koncentrációja közötti összefüggés tanulmányozására.

Az extenzométeres és mikrobarográf adatok együttes elemzése során megállapították, hogy (1) a jelenleg alkalmazott módszerek csak részlegesen alkalmasak az árapálmérések barometrikus korrekciójára, (2) az obszervatórium környezetének sajátos topográfiaja jelentősen csökkenti a légnyomásnak az extenzométeres mérésekre gyakorolt hatását.

A korábban extenzométerek obszervatóriumi in-situ kalibrálására kifejlesztett berendezést és kalibrálási módszert alkalmassá tették – először a világon – rúd és huzal extenzométerek kalibrálására.

A Dunaföldváron 2002 és 2007 között mért dőlésmérési és hidrológiai (csapadék, talajvízszint, Duna vízállás) adatsorok között egyértelmű összefüggést találtak. Dőlésmérési adatok és műhold felvételek segítségével kimutatták az egyes hidrológiai folyamatok hatásának összegződését. GPS technika és nagy pontosságú fúróluk-dőlésmérők segítségével nagy térbeli pontossággal követték nyomon a dunaszekcsői partfalmozgás során fellépő deformációkat, és a legveszélyeztetettebb zónákra vonatkozó adatokat az önkormányzat és a Katasztrófavédelmi Főigazgatóság rendelkezésére bocsátották. A dunaszekcsői partfalon a dőlésmérők a mozgások időbeli lefolyásáról részletes, a hidrológiai adatsorokkal jól korrelálható adatokat szolgáltatottak. Kimutatták, hogy a gyors csuszamlás előtti jellegzetes

mozgások más földtani paraméterekkel együtt alapul szolgálhatnak egy korai riasztórendszer kifejlesztéséhez.

CCD kamerás érzékelő-rendszert illesztettek a LaCoste-Romberg G típusú graviméterhez, mely lehetővé teszi a folyamatos obszervatóriumi árapály észlelést  $\pm 1 \mu\text{Gal}$  felbontással. Ezzel a módszerrel a pusztán optikai leolvasó berendezéssel ellátott műszerek árapály-hatásra adott válasza is meghatározható, melynek ismeretében a terepi mérések árapály korrekciói pontosíthatók.

*Elméleti eredmények (A kutatásban résztvevők száma 7 fő volt, a rendelkezésre álló pénzkeret mintegy 38 millió forintot tett ki, mely 10%-ban pályázati pénzekből eredt.)*

Megállapították, hogy helyi elhelyezésű hagyományos geodéziai hálózatok esetében az ún. hétparaméteres hasonlósági transzformáció helyett célszerűbb az ötparaméteres transzformációt alkalmazni. További előnyként kimutatták, hogy az ismeretlenként kezelt geoidundulációk egy járulékos kényszerfeltétel bevezetésével megbecsülhetők, továbbá a három eltolási, egy elfordulási és egy méretarány paraméter a helyi rendszer valós tájékozási paramétereit szolgáltatja a pontosabb geocentrikus GPS rendszerben.

Transzformációs eljárás segítségével két helyi geoidot határoztak meg. A HD72 rendszer GRS67 ellipszoidi koordinátáihoz a Balti magasságokat kapcsolták, és a 3D GPS (WGS84) koordinátákhoz történő transzformációval becsülték meg a helyi GPS geoidot. A második megoldásnál a GRS67 felületi pontok transzformációját a WGS84 ellipszoid felületi pontokhoz adott abszolút gravimetriai geoidhoz viszonyítva végezték el. A geoidok jó egyezést mutatnak, de örökölték a globális GPS és gravimetriai geoidok jellegzetes eltéréseit. A 7 paraméteres, 3D transzformációs feladat nemlineáris megoldásának felhasználásával igazolták, hogy a kovariancia mátrix elméleti becslése előnyösen hat a transzformációs eljárás numerikus pontosságára. Monte-Carlo szimulációval megmutatták, hogy a hagyományos, linearizált megoldás pontosságvesztéssel jár a nemlineáris direkt megoldással szemben. A 4 paraméteres, 2D hasonlósági transzformációra új modellt vezettek be, és bebizonyították, hogy a skálaparaméter Gröbner bázisú megoldása azonos az analitikus megoldással.

#### *Geofizikai Főosztály*

*Úridőjárás-, űrklíma- és aeronómiai kutatások, amelynek társadalmi haszna az indukciós kockázat, illetve a globális klímaváltozás okainak jobb megértése. Résztvevők: 9 kutató és 4 segédedő. A pénzügyi forrás (mintegy 50 MFt) 80%-ban pályázati és megbízási forrásokból származott.*

A nagyecenki, mintegy másfél évtizednyi Schumann-rezonancia adatsorban a globális felmelegedés hatására utaló hosszú terminusú változást találtak, amely a világ zivatar-tevékenységének globális átrendeződésére utal.

Nagyecenken és Izraelben párhuzamosan megfigyelt ELF tranziensek nappal-éjszakai aszimmetria vizsgálata alapján megállapítást nyert, hogy a Schumann rezonancia (SR) háttérmérésekben felfedezett és a nappal-éjszakai terminátorvonalnak az obszervatóriumon történő áthaladásával kapcsolatba hozható spektrális amplitúdó-változás a különálló tranzienseknél is megfigyelhető, mégpedig a háttérmérésekkel egyező nagyságrendben.

A légköri elektromos potenciál-gradiens Reading – Nagycenk közötti összehasonlítása alapján kijelenthető, hogy két távoli állomás között a felszínen mért PG napi változása a téli hónapokban mutatja a legjobb hasonlóságot, így a globális változások is leginkább a téli időszakban érvényesülhetnek az egyes szárazföldi állomásokon.

Az ionoszférában az F2 réteg magassága (hmF2) hosszú időtartamú változásának földrajzi eloszlását új szempont, nevezetesen az óceáni áramlások hatásának a figyelembe vétele alapján sikerült megmagyarázni. A nem-migráló légköri ár-apályhullámok kialakulását a tengerek és a szárazföld között kialakuló hőmérsékletkülönbség idézi elő. Az óceáni áramlások ezt a hőmérséklet-eloszlást erősíthetik. A levegő lehülése/felmelegedése lefelé/felfelé irányuló áramlást és így a hmF2 csökkenését/növekedését idézi elő.

Az INTERMAGNET hálózatban továbbra is a legmegbízhatóbb adatszolgáltatók szűk csoportjába tartoznak. Földi Elektromágneses Adatbázist hoztak létre és elkészítették az internetes megjelenítésre alkalmas web-felületet (elérhetőség: [www.fema.ggki.hu](http://www.fema.ggki.hu)). Az adatbázis geomágneses (órás abszolút H, D, Z értékek; K geomágneses aktivitás index, T tellurikus aktivitás index), valamint légköri elektromos potenciál-gradiens adatokat tartalmaz. Cluster műhold-adatokkal vizsgálták a diffúziós transzport-folyamat részleteit a magasabb energiájú (30-160 keV) ionok esetében. Közepes napszélnél a parciális ionsűrűségek lökeshullámtól való karakterisztikus távolságai számottevően magasabbak, mint magas értékű napszél sebesség esetén, ugyanakkor a számított diffúziós együttható értékek jó egyezést mutatnak a 30 keV energiájú ionok esetében. Ugyanakkor alacsonyabb energiákon (kb. 10 keV esetén) az energia csökkenésével együtt növekszik a különbség a diffúziós együtthatók között. Ez arra enged következtetni, hogy alacsonyabb energiákon az ionok viselkedését a diffúziós transzporttal leírható folyamat mellett valamilyen más fizikai folyamat (is) befolyásolja.

A mágneses hullámokat a földi lökeshullámtól való távolság függvényében vizsgálva úgy találták, hogy a lökeshullámtól távol a diffúz ionokat valóban mágneses hullámok csillapítják, de a lökeshullámhoz közel a kompressziós hullámok számottevő intenzitásnövekedése miatt másféle típusú (eddig ismeretlen) fizikai folyamat vezérli a szóródási folyamatokat és a meglévő elméleti modell nem alkalmazható.

*Elektromágneses szerkezetkutatás és környezet-geofizika, amelynek gazdasági-társadalmi haszna a geopotenciál megismerése és jövőbeni feltárása, illetve az egészséges környezeti feltételek biztosítása.*

*Résztevők száma: 4 kutató és 2 segéderő, a költségek (mintegy 20 MFt) 50-60%-ban pályázati és megbízási forrásból származnak.*

A nagycenki felszíni elektromágneses impedancia-tenzor komponenseiben szignifikáns hosszú-periódusú (27-napos, féléves és éves) modulációt mutattak ki. Bizonyították, hogy a tenzor-elemek hosszú-periódusú variációja közvetetten az interplanetáris térből a magnetoszférába csatolódtott teljes energia függvénye.

Megállapították, hogy a CEL-7 ausztriai szakaszán az elsőrendű tektonikai vonalak mentén nincsenek a Magyarországon előforduló vezetőképesség-anomáliához hasonló indikációk: mindössze kisebb vezetőképesség-növekedés jelzi a kőzetbeli és tektonikai átmenetet.

Laboratóriumi kőzetvizsgálatok igazolták a grafitos képződmények mint kis viszkozitású, elektromosan jólvezető anyagok befolyását a földrengések folyamatára.

Elméletileg tisztázták, hogy a mágneses permeabilitást figyelembe nem vevő magnetotellurikus inverzióval az anomálishan mágneses réteg valódi fajlagos ellenállása és vastagsága helyett a relatív mágneses permeabilitással megszorított érték, azaz megnövekedett vastagságú és fajlagos ellenállású fiktív réteg adódik.

Kiterjedt terepi magnetotellurikus adatrendszeren elvégzett szisztematikus elemzésekkel igazolták, hogy a reális tenzor-elemekből álló invariánsok jelentősen kisebb periódusidő esetén nyújtanak a mélyszerkezetről információt, mint az imaginárius vagy vegyes eredetű invariánsok. A magasabb rendű geoelektromos tenzor-invariánsok kevésbé érzékenyek mérési paraméterek változására, de fokozottan zaj-érzékenyek.

A felszíni geoelektromos elrendezéseket egymással összehasonlítható kutatási mélység- és felbontóképesség-adattal jellemezték, és a bevezetett mérőszámból kiindulva számos terepi és laboratóriumi kísérleti mérést végeztek az egyes elrendezések speciális erősségeinek kimutatására.

Egy eltemetődött ókeresztény sírkápolna falainak feltérképezése céljából végzett különféle geofizikai térképezési eredményeket összehasonlítva az általuk kigondolt ún. szűrőpróba módszer eredményeivel megállapították, hogy a szűrőpróba módszer nem csak gyorsasága, egyszerűsége és olcsósága, hanem leképezési tulajdonságai terén is állja az összehasonlítást több más geofizikai módszerrel.

### *Szeizmológiai Főosztály*

*A nemzeti földrengés megfigyelő hálózat fejlesztése, a megfigyelések eredményeinek feldolgozása, értelmezése és társadalmi hasznosítása (4 kutató és 2 segéderő vett részt a munkában). A rendelkezésre álló pénzkeret 28 millió forint volt. A megfigyelő hálózat eszközei és ezen belül műszerei árát pályázatokból biztosították. Az állomás kiépítési, üzemeltetési, valamint az adatfeldolgozási és értelmezési költségek 50%-a származik költségvetési forrásból.*

Folytatták a 2004-ben megkezdett szélessávú földrengésjelző hálózat fejlesztését: a 2007-ben a Budapesti Földrengésjelző Observatóriumban létrehozott szeizmológiai hálózati központban új működtető szoftvereket alkalmaztak. A SeisComP komplex adatgyűjtő szoftver 3-as verziója a korábbinál bővebb szolgáltatásokat biztosít. Egyik legfontosabb újdonsága a korábbi változathoz képest, hogy több eszköz áll rendelkezésre az állomáshálózat állapotának felügyeletéhez. Az állomások pillanatnyi állapota térképen is nyomon követhető, valamint egy táblázatban is megjelennek a legfontosabb működést befolyásoló paraméterek. A beérkező adatok valós időben grafikusan is megjelennek a képernyőn. A program automatikus földrengés-felismerést és helymeghatározást is végez, az eredményt szintén térképen jeleníti meg.

2008-ban átlagosan havi 1 500 földrengést (összesen mintegy 18 000 eseményt) detektáltak és tekintettek át. Ebből 160 volt az  $ML=0.4-3.5$  magnitúdó tartományba eső helyi, illetve közeli rengés. Ezek paramétereit kiszámították. Mikroszeizmikus adatfeldolgozásaik eredményeit

megküldték a nemzetközi adatközpontnak (ISC), valamint az együttműködő nemzeti szeizmológiai szolgálatoknak.

2008 folyamán öt olyan rengés keletkezett Magyarországon, melyek hatásairól makroszeizmikus adatok voltak begyűjthetők és feldolgozhatók. Ezek epicentrális intenzitásai I-IV EMS és I-V EMS közötti értékűek voltak. A 2008-ban feldolgozott mikro- és makroszeizmikus adatokból állították össze a Magyarországi földrengések évkönyve, a Hungarian Earthquake Bulletin 2008 anyagát.

A jelenkori tektonikai folyamatok megismerésének fontos eszköze a földrengések fészekmechanizmusainak meghatározása szeizmogramok alapján. Ilyen adatfeldolgozást 2008-ban újabb hazai földrengések esetében sikerült részben vagy egészen elvégezni. Több éves munkájuk alapján összeállították a hazai, illetve közeli földrengések fészekmechanizmus táblázatát és térképeit.

Szeizmológiai adatfeldolgozó tevékenységük során módszereket próbáltak ki a kis,  $M=1-2$  méretű földrengések és a bányászati tevékenységgel kapcsolatos robbantásos események megkülönböztetésére. Ez a vizsgálati tevékenység elsősorban a Vértes-hegységben és a Mátrában regisztrált események esetén fontos, ahol jelentős a robbantásos tevékenység is.

A Kárpát-medence, a Dinári-hegység és a Keleti-Kárpátok területének 1900-2006 között kipattant földrengéseinek statisztikai vizsgálata során elemezték a földrengések eloszlásának időbeli változását, a variációs együtthatókat, a visszatérési időket és azok fraktál tulajdonságait a „D” fraktál dimenziót.

A földrengések során kialakuló talajfolyósodás a teherbíró képesség csökkenését és a felszín süllyedését vonja maga után. Megállapították, hogy erre a jelenségre a helyi földtani szerkezet mellett az inputként alkalmazott földrengés akcelerogramok csúcsgyorsulásai, valamint azok spektrális tulajdonságai is hatással vannak.

A Magyar Szabványügyi Testület keretében végzett több éves munkájuk eredményeként 2008-ban elkészült a földrengésre való méretezésre vonatkozó MSZ EN 1998-1 (EUROCODE 8) szabvány.

Az Országos Atomenergia Hivatal megbízásából dolgoztak a hazai Nukleáris Biztonsági Szabályzat módosításán, mely a nukleáris területen több évtizedre fogja meghatározni a szeizmológiai kockázatok kezelésének módját és terjedelmét.

Folytatódott aktív részvételük az Átfogó Atomcsend Egyezményt ellenőrző szervezet (CTBTO) szakértői csoportjában.

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

A fészekmechanizmus meghatározására kidolgozott, a hullámforma inverzió alapuló, eljárásukkal a hipocentrumban lejátszódó folyamatoknak a korábbiaknál pontosabban és hatékonyabban leíró eszközét sikerült megvalósítaniuk. Pontosabbá vált a fészek mélységének meghatározása is.



A 2008-ban végzett, földrengés veszélyeztetettséggel kapcsolatos, érzékenységi vizsgálataik célja a valószínűségi földrengés-veszélyeztetettség meghatározás (PSHA) bemenetét képező modell legkritikusabb részeinek azonosítása volt. Számításaik azt mutatják, hogy a veszélyeztetettség bizonytalanságát alapvetően néhány kulcstényező határozza meg. A legnagyobb hozzájárulás a gyorsulás-gyengülési görbék és a zóna felosztás bizonytalanságából ered, míg a maximális várható magnitúdót leíró változók jóval kisebb episztemikus bizonytalanságot mutatnak és a Gutenberg-Richter-féle gyakorisági egyenlet paramétereinek különböző számítási módjai sem befolyásolják érdemben a veszélyeztetettségi görbe menetét.

A földköpenyben zajló áramlások felszálló ágainak (hőoszlopok) és a felettük kialakuló felszíni megnyilvánulások kvantitatív vizsgálatával foglalkoztak háromdimenziós numerikus modellezés segítségével. Számításaik során tisztázták a Rayleigh-szám és a mélységfüggő viszkozitás megválasztásának hatását a köpeny konvekció felszálló ágának dinamikájára. A Rayleigh-szám növelésével a feláramlás felgyorsul. Nagy viszkozitású tartományokban az áramlás sebessége csökken, az állandó tömegfluxus fenntartása miatt a hőoszlopok alulról jellegzetes, felfelé keskenyedő alakot vesznek fel.

A Római Egyetem Földtudományi Intézetének munkatársaival együttműködve elkészítették az 1900-2006 időszakban kipattant  $M_w \geq 7.0$  földrengések globális katalógusát, mely tartalmazza az egyes rengések méretét, koordinátáit, fészekmélységeit.

A Journal of Geodesy szerkesztőségének felkérésére tanulmányt készítettek „Geodetic aspects of seismological phenomena” címmel. Ebben elméleti szempontból foglalkoznak az időfüggő geodéziai folyamatok (deformációk, árapály, forgásvektor) szeizmológiai hatásaival. Munkájukban áttekintik a két tudományterület kölcsönös egymásráhatását tudománytörténeti szempontból is.

A Geodéziai Főosztállyal közösen végzett kutatásokban négy kutató vett részt. Az együttműködés pénzügyi fedezetét a Generali Providencia Biztosító Rt megbízása, OTKA projekt támogatás, MTA-Bolgár TA bilaterális együttműködés biztosították.

Budapest belváros földrengés-veszélyeztetettségét a Generali-Providencia Biztosító Rt. megbízásából a „Budapest belterületének determinisztikus földrengés-veszélyeztetettsége” projekt keretében determinisztikus földrengés kockázati (DSHA) eljárás segítségével vizsgálták. Szintetikus szeizmogramok spektrumaiból meghatározták a kutatási terület csúcs gyorsulás értékeit és azok frekvenciáit. Több helyen (Tabán, Mészáros utca és Hegyalja út találkozási, Vérmező, Szilágyi Dezső-tér környéke a budai oldalon, Martinelli tér környéke a pestin) kimutatható az altalaj két-, vagy háromszoros gyorsulásnövelő hatása. A területen lévő épületek sajátfrekvenciájának meghatározására Budapest belvárosának több épületében, különböző szinteken mikroszeizmikus zajméréseket végeztek. Az épületek rezonancia frekvenciáját Nakamura módszerével határozták meg. Ennek alapján tapasztalati összefüggést kaptak az épület szintjeinek száma és a rezonancia frekvencia között. A DSHA eljárás eredményeként előálló válaszspektrum és az épületek rezonancia frekvenciái ismeretében lehetővé vált a rezonancia effektus által veszélyeztetett területek kijelölése. A legveszélyeztetettebb épületek a Budai Vár északi részén, a Tigris utca – Naphegy tér környékén, a Dózsa György tér – Apród utca közötti területen, továbbá a pesti oldalon a Városháza és környékén találhatók.

Álló cseppköveket vizsgáltak Bulgáriában a Nyugat-Balkánban, és a Rodope hegységben. Elméleti számítások és in-situ mérések alapján megállapították a Nyugat-Balkánban vizsgált cseppkövek horizontális talajgyorsulás hatásra történő eltörésének frekvenciáit. A Bolgár Építési Kód a barlangok területére az általuk kapottakhoz hasonló értékeket ad meg. Elmondható: a cseppkő vizsgálat alapján sem keletkezhetett a Kódban szereplő gyorsulás-értékeknél lényegesen nagyobb földrengés az adott területen. Ez az eredmény, a barlangokhoz közeli Szófia főváros földrengés-veszélyeztetettsége szempontjából, bír jelentőséggel.

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

#### *Hazai intézményi kapcsolatok:*

MTA Geodéziai Tudományos Bizottság (elnök), Geofizikai Tudományos Bizottság, Komplex Doktori Bizottság, VEAB szak- és munkabizottságok, Úrkutatói Tudományos Tanács, IUGG, IAGA, COSPAR, URSI, IAG, IASPEI EASE, EAEE, IAEE, Nemzetközi Litoszféra Program nemzeti bizottságai, MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíj Kuratórium (2 fő), Földtudományi Szakértői Kollégium, Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézet, Magyar Állami Földtani Intézet, MFTTT elnöksége, Magyar Geofizikusok Egyesülete, Magyar Asztronautikai Társaság, Kormányzati Koordinációs Bizottság Tudományos Tanácsa, MTA Matematikai és Természettudományi Kuratórium, AKVT, Nyugat-Dunántúli Regionális Fejlesztési Tanács, IIF Alkalmazói Tanács, HUNGARNET, OTKA Szakkollégium, Acta Geodaetica et Geophysica Hungarica szerkesztősége (főszerkesztő is), EUROCODE 8 Szabványosítási Bizottság, NAÜ Földrengés Szakértői Bizottság, Kormányzati Koordinációs Bizottság Tudományos Tanácsa és Földrengés Elleni Védekezés Munkabizottsága, Doktori iskolai tagságok (NYME, ELTE, BME, ME), doktori és habilitációs bizottsági tagságok (NYME, BME), MAB Föld- és Környezettudományi Bizottság, Föld Bolygó Nemzetközi Éve Magyar Nemzeti Bizottság, MTA Elnöki Környezettudományi Bizottság

#### Hazai oktatási tevékenység:

NYME: környezeti képzés, Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola geo-környezettudományi program, matematikai alapozó tárgyak, diplomamunka-konzulens, bírálóbizottság diplomavédésnél, doktori szigorlatoknál, doktori témavezetések, államvizsga bizottság, ELTE és Miskolci Egyetem: földtudományi előadások, doktori iskola előadások, gyakorlatok és szakdolgozatok, doktori témavezetések, BMGE: doktori iskola előadások.

#### *Nemzetközi kapcsolatok:*

Geophysical Prospecting (Deputy Editor), Journal of Applied Geodesy (Editorial Board), Contributions to Geophysics and Geodesy (Advisory Board), CEI Earth Science Committee of the WG Science & Technology (Secretary General), CEI Working Group on Earthquakes (coordinator). IAGA 11th Scientific Assembly (Sopron, 2009. augusztus 23-30.) szervezőbizottság, E-STAR (European Solar Terrestrial and Atmospheric Research) program, COST 296, WP1.4, 2.2 (Mitigation of Ionospheric Effects on Radio Systems), COST 625 (3D monitoring of active tectonic structures), COST 721, COST P18 (The Physics of Lightning Flash and its Effects). JGR, Studia Geoph Geod, J. Geodyn, Geoph. Prospecting, Geophysics, Terra Nova stb. cikkek bírálata. Brémai Nemzetközi Egyetem, Prágai Légekőfizikai Intézet, Pekingi Földtudományi Intézet, L'Aquila-i Egyetem, Bécsi Akadémia Úrkutatói Intézet,

Grazi Műszaki Egyetem, Jénai Egyetem, Neuchatel-i Egyetem, Reading University, Massachusetts Institute of Technology, Parsons Laboratory, USA, Tel Aviv University, Bécsi Műszaki Egyetem, Université Paris Sud, CETP (St. Maur), GeoForschungsZentrum Potsdam, Observatoire de Paris, Teheran University, Stuttgart University, Darmstadt University of Technology, Institut of Oceanography of the Russian Academy of Sciences, Usikov Institute for Radio-Physics and Electronics National Academy of Sciences of Ukraine. IAG és IAGA munkacsoportok.

Külföldi oktatási tevékenység: Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Az MTA kétoldalú együttműködési kereteket többségében kihasználták. Példák: MTA szlovák-magyar kétoldalú (a Pannon-medence recens tektonikai folyamatainak megfigyelése extenzométerekkel, amelyben közös adatkiértékelés és az eredmények interpretálása történt); bolgár-magyar MTA bilaterális együttműködés (a 2007. évi bulgáriai barlangban végzett mérések feldolgozása, publikálása történt meg, hozzájárulva Szófia földrengéskockázatának meghatározásához); orosz-magyar MTA bilaterális együttműködés (a földmágneses dipólustér erősségének változását szolgáltató adatbázis fejlesztése. Az eredményeket az Oceanology-ban publikálták); német-magyar MTA bilaterális közös kutatások (a Föld fizikai történetével foglalkozó tárgykörben).

TÉT utaztatás 2008-ban nem volt.

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

##### *Hazai pályázatok*

A Föld Bolygó Nemzetközi Éve alkalmából megjelent ismeretterjesztő füzet sorozat magyar nyelvű változatának (a GEO-FIFIKA címmel megjelent 12 füzet) nyomdai és internetes megjelentetése ([www.foldev.hu/geofifika.htm](http://www.foldev.hu/geofifika.htm)) szemléletformáló, sikeres kezdeményezésnek bizonyult.

NKTH Mecenatúra pályázat alapján az MTA GGKI által szervezendő IAGA 11th Scientific Assembly-re (Sopron, 2009. augusztus 23–30, [www.iaga2009sopron.hu](http://www.iaga2009sopron.hu)) – részvételi támogatást nyertek hazai és külföldi kutatók számára.

A T61800: „Korszerű matematikai módszerek a geodéziában” c. OTKA-kutatás keretében új matematikai modelleket dolgoztak ki alapvető geodéziai feladatokra. A kutatás eredményeit 10 tudományos folyóiratban és 9 előadás keretében ismertették.

Az új elnyert OTKA-pályázatok (K72474, K71952) az intézeti témák sikerességét, a megújuló képességet bizonyítják.

A 2008 végén záródó Földi elektromágnesség c. (OTKA 61013 számú) pályázat az Intézet számára a generációváltás lehetőségét biztosította.

##### *Nemzetközi pályázatok*

EVR1-CT-2002-00507, MEREDIAN-2, Szeizmológiai hálózatok fejlesztése, (EU5 keretprogram) hozzájárult a budapesti földrengési adatközpont fejlesztéséhez

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

1. Glover P, Ádám A: Correlation between crustal high conductivity zones and seismic activity and the role of carbon during shear deformation. *Journal of Geophysical Research*, Vol. 113, B12210, doi: 101029/2008JB005804 (1-8) (2008)
2. Mentés G: Observation of recent tectonic movements by extensometers in the Pannonian Basin, *Journal of Geodynamics*, 45, 169-177. (doi:10.1016/j.jog.2007.10.001) (2008)
3. Papp G, Szeghy E, Benedek J: The determination of potential difference by the joint application of measured and synthetical gravity data: a case study in Hungary. *Journal of Geodesy*, DOI: 10.1007/s00190-008-0257-2 (2008)
4. Sátori G, Williams E, Lemperger I: Variability of global lightning activity on the ENSO time scale. *Atmospheric Research*, 91, 500-507 (2008)
5. Szalai S, Szarka L: On the classification of surface geoelectric arrays. *Geophysical Prospecting*, 56(2), 159-175(17) (2008)
6. Szeidovitz Gy, Surányi G, Gribovszki K, Leél-Őssy Sz, Bus Z, Varga Zs: Estimation of an upper limit on prehistoric peak ground acceleration using the parameters of intact speleothems in Hungarian caves. *Journal of Seismology*, Vol 12(1): 21-33 (2008)
7. Újvári G, Varga A, Balogh-Brunstad Zs: Origin, weathering, and geochemical composition of loess in south-western Hungary. *Quaternary Research* 69, 421-437 (DOI: 10.1016/j.yqres.2008.02.001) (2008)
8. Varga M, Novák A, Szarka L, Application of tensorial electrical resistivity mapping to archaeological prospection. *Near Surface Geophysics*, Vol. 6, 39-47 (2008)
9. Zieger B, Hansen K.C: Statistical Validation of a Solar Wind Propagation Model From 1 to 10 AU. *Journal of Geophysical Research*, 113, A08107 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	66	Ebből kutató <sup>2</sup> :	32
PhD, kandidátus:	12	MTA doktora:	5
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			84
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			68
Ebből impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	14
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	11	idegen nyelven:	39
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	23,335	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	502
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			395
Magyarul könyv <sup>7</sup> /atlasz:	1	könyvfejezet:	3
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	ebből külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	59	posztterek száma <sup>10</sup> :	36
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			24
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	32	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			22
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	7	Diplomamunkát:	2
		PhD-t:	12
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			2010
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			306,1 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	2	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	67 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			7
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	40,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8,1 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			6
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18,4 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			9,2 MFt

## **GEOKÉMIAI KUTATÓINTÉZET**

1112 Budapest, Budaörsi út 45.

Telefon/Fax: 319-3137

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

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

Az intézet fő feladata geokémiai alapkutatások végzése a kőzetgenetika, az ásványi nyersanyag-képződés és a környezetgeokémia területén. Ennek megfelelően a beszámolási évben is folytatták a nagy hagyományokkal és széleskörű szakmai elismertséggel rendelkező alapkutatási témák művelését. Ezek keretében vizsgálták a magmás és metamorf képződmények, illetve a velük együtt előforduló fluidumok képződési körülményeit és jellegzetességeit, valamint az ásványi nyersanyagok képződési körülményeit. Környezettudományi kutatásaik keretében tanulmányozták a múltbéli és jelenkori környezet állapotát és változásait. Kutatták a nehézfémek talajbeli viselkedését, a közelmúlt klímaváltozásait dokumentáló földtani képződmények geokémiai jellegeit, továbbá a hévizek szerves komponenseinek sajátosságait. Tanulmányozták az épített környezetet és a kulturális örökségünk tárgyi emlékeit ért antropogén hatásokat is. Folytatódott a radioaktív hulladékok elhelyezésére kiválasztott földtani képződmények komplex geokémiai vizsgálata is.

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

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

*A metamorf ásvány-kőzettani kutatásaik keretében kidolgozták a dioktaédes szerkezetű világos csillámok rétegek közötti kation tartalmának eloszlására, rendeződési mechanizmusára vonatkozó ún. domén modellt. A domének képződési folyamatát leíró modell ötvözi a kevertréteges szerkezeti modell és a rendezetlen, átmeneti összetételű fázisok modelljének bizonyos elemeit is. A modell értelmezi a világos csillámok növekvő hőmérséklettel végbemenő diagenetikus és kezdeti metamorf fejlődését és több, eddig nem megfelelően értelmezhető jelenség magyarázatául szolgálhat.*

A nyírásos tektonikai deformáció rétegszilikátok rendezettségi paramétereire gyakorolt hatását vizsgálták a Bükk-hegység középső triász metavulkanit összletén. A mezoszkópos megfigyeléssel milonitnak meghatározott szerkezet a mikroszkópos megfigyelések szerint a rideg szemcsék intenzív mikro-töréses és a rétegszilikát mátrix oldódásos anyagszállítással kísért intergranuláris csúszásos mechanizmusai révén jött létre. A nyírásos deformációval együtt ható fluid migráció hatására a deformáció viszonylag szűk zónákra korlátozódott. A filloszilikát paraméterek egyöntetűen az anchi-/epizónák határának megfelelő (kb. 300-350°C) csúcshőmérsékletet jelölnek. Az ezt követő lehűlő (retrográd) szakaszban kb. 76 millió évvel ezelőtt ment végbe a fent jellemzett, a nemzetközi szakirodalomban eddig még gyakorlatilag nem tárgyalt jelenség.

A finomszemcsés, sziliciklasztos metamorf kőzetek esetében összefüggést mutattak ki a K-Ar koradatok és a szemcseméret, továbbá a „kristályosság” indexek és krisztallitvastagság értékek között, mind diagenetikus, anchimetamorf, és epimetamorf átalakulást szenvedett képződmények esetében. Ezeket az összefüggéseket a szemcsemérettel növekvő mértékű detritális hatással és a K-Ar rendszer csökkenő mértékű lenullázódásával magyarázták.

Az ausztriai Grauwacke zóna és a Tauern ablak eltérő metamorf fokú képződményeit elválasztó Salzachtal-Ennstal transzpressziós zóna képződményein elvégzett filloszilikát „kristályosság” index-mérések, valamint a szervesanyag-termométer eredmények együttes alkalmazása bizonyította az oligocén-miocén termális hatás okozta advektív hőtranszport és fluidum-cirkuláció hatását, amely felülírta a kréta nagyhőmérsékletű anchi-epimetamorf kőzetátalakulást a vizsgált zóna mentén.

A metamorf ásvány-kőzettani kutatások eredményeinek hasznosulása elsősorban földtani alapkutatói jellegű. Ezek az eredmények hozzájárulnak a Kárpát-medence és tágabb környezete metamorf képződmények jobb megismeréséhez, ezáltal a terület pontosabb geodinamikai rekonstrukciójához. A rétegszilikátok rendezettségi viszonyaira vonatkozó eredmények a nemzetközi metamorf kőzettani alapkutatóban csakúgy, mint a (hazai) környezetföldtani, -geokémiai kutatásban (pl. radioaktív hulladékok tárolása földtani környezetben stb.) is hasznosíthatóak.

*Ezekben a kutatásokban 12 kutató vett részt, ebből 3 fő volt a GKKI alkalmazásában. A kutatásokra fordított összeg 2,9 MFt volt, amely pályázati forrásból származott.*

*Magmás kőzetan-geokémiai kutatásaik* körében egy kanadai karbonatit-kimberlit összlet gyémántpotenciálját határozták meg, amelynek során az intézet kutatói stabilizotóp-geokémiai elemzésekkel meghatározták a kőzetösszlet széntartalmának eredetét. Eszerint a széntartalom elsődlegesen karbonatit formában van jelen, ugyanakkor a gyémántpotenciált jelző kimberlitekben előforduló ásványok is megtalálhatóak az összletben. A gyémántkutatás egy másik aspektusát a karbonado gyémántok elemzése adják. *Sensu stricto* karbonado gyémántok Közép-Afrikában és Braziliában találhatóak torlatokban. Speciális mikrokristályos szövetük ékkőnek nem, csak ipari alkalmazásra teszi alkalmassá őket, viszont különleges tulajdonságaik (szűk elterjedési terület, porózus szövet, kéregeredetű zárványok, könnyűszénizotóp-dúsulás stb.) miatt a tudományos érdeklődés homlokterébe kerültek. Az intézetben végzett, nemzetközi értelemben véve is újszerű stabilizotópos elemzések eredményei arra utalnak, hogy a gyémántok legvalószínűbb eredete köpenyeredetű fluidumokból nagy hőmérsékleten történő kristályosodás.

A gyémántkristályosodás körülményeinek vizsgálatára 8.5 GPa nyomáson végzett kísérletek termékeinek elektron-mikroszondás vizsgálatát végezték el. A kísérletek során a gyémánttal kristályosodott gránát és klinopiroxén összetétele ugyanabba a tartományba esett, mint a természetes polikristályos gyémántokban talált klinopiroxén és gránát összetétele. A nagy nyomású kristályosodás során a Ti a gránát kristályrácsába lépett be, a klinopiroxén szinte teljesen Ti mentes volt. Az eredmény arra utal, hogy a Ti megoszlása erősen függ a nyomástól. A nagy nyomású klinopiroxének viszonylag nagy K<sub>2</sub>O tartalma (0.10-0.20 s%) arra utal, hogy nagy nyomáson a karbonát mellett a klinopiroxén a kálium fő hordozó ásványa.

A magmás közettani-geokémiai eredmények részben alapkutató jellegűek. A gyémántkutatás közvetlen gazdasági és társadalmi haszna egyelőre nem állapítható meg. Ezen kutatások során szerzett módszertani és metodikai tapasztalatokat azonban az archeometriai és környezetgeokémiai kutatásokban is lehet alkalmazni. A kutatásokban 9 kutató vett részt, ebből 9 fő a GKKI alkalmazottja. A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 3 MFt volt, további 3,2 MFt volt pályázati forrásból elnyert összeg.

*A hazai ásványi nyersanyagok kutatása* során folytatták a Dunántúli-középhegység jura időszakában felhalmozódott üledékes környezetű Mn-telepek vasas, kovás, oxidos, illetve vasas, oxidos képződményeinek ásványtani, geokémiai és szöveti vizsgálatát. Mélyfúrások és fúrési magminták kémiai adatsorainak matematikai statisztikai és 3D térinformatikai feldolgozását is folytatták a Csárdahegy területére, az úrkúti karbonátos ércesedésre és az úrkúti medencét alkotó formációkra vonatkozóan.

Az eredmények az ércképződés folyamatának megértését segítik elő, de közvetve a környezetszennyezés és elhárítás, valamint a bánya-rekultivációs tevékenység keretében hasznosíthatók.

*Az eredményeket 8 fős kutatócsoport érte el, ebből 5 fő volt a GKKI alkalmazásában. A kutatásokra fordított összeg 3 MFt volt, amely pályázati forrásból származott.*

*A földtani környezet geokémiai állapotának és változásainak vizsgálata*

Folytatták a radioaktív hulladékok elhelyezésére kiválasztott földtani képződmények komplex ásványtani-geokémiai vizsgálatát. Genetikai és környezetgeokémiai szempontból értékelték a Bábaapátiban épülő Nemzeti Radioaktív Hulladék-tároló természetes agyagos összetételű zárózónáit. Agyagásványtani szempontból négy különböző típusú zónát különítettek el: 1. szmektites; 2. corrensites, klorit/vermikulitos; 3. paligorszkitos és 4. illites. Eredményeik szerint egy esetleges radionuklid kiszökés és migráció alkalmával az agyagos-karbonátos átalakulási zónák mint gátak működhetnek, mert megkötik a radionuklidokat. Különösen jó adszorbens a corrensit és a montmorillonit. Az adszorpcióban várhatóan a rácsszéli változó töltésű helyeknek van szerepe, de jelentős a fémionok kicsapódása is az alkalikus-karbonátos oldatokból.

Az eredmények a kis és közepes radioaktivitású hulladékok földtani környezetben történő elhelyezésének biztonságát növelik, új alapadatokat szolgáltatva a tervezéshez. A vizsgálatoknak regionális, sőt országos jelentősége van, hiszen a radioaktív hulladékok tárolójának esetleges működési zavara a regionális életminőséget rendkívüli mértékben ronthatja, az esetleges kárelhárítással kapcsolatosan felmerülő költségek pedig nemzetgazdasági mértékűek lehetnek. Az eredményeket 4 fős kutatócsoport érte el, ezek mindegyike a GKKI alkalmazottja.

*A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 9,7 MFt volt.*

*A nehézfémek geokémiai körforgalmának vizsgálata* témakörben folytatták a talajalkotó ásványszemcsék nehézfém-megkötő képességét vizsgáló kísérletsorozatot. Kimutatták, hogy meszes talajokban a lúgos kémhatás a réz esetén, az ásványszemcséken történő nagyobb megkötődést, míg az ólomnál a kicsapódás jelentőségének növekedését eredményezte. Ezzel szemben a cink esetében egyik folyamatot sem tapasztalták akkor, ha Cu és Pb is jelen volt a kiindulási oldatban. Kimutatták továbbá az egyedi ásványszemcsék esetében a vas, illetve



vasfázisok és az agyagásványok szoros összeszövődésének eredményeképpen megnövekedett nehézfém-megkötő képességét is. Az ólom jelentős megkötődését a teljes talajmintákon nem igazolták az egyedi talajalkotó szemcséken mért megkötött ólom mennyiségek mutatva a szerves anyag jelentős szerepét az ólom talajbeli megkötődésében.

A természetben és a hulladéktárolók alatt végbemenő folyamatok modellezése céljából nehézfémekkel (Cu, Pb, Zn, Cd, Co) adszorbeált agyagásványokat (különböző rétegtöltésű montmorillonitok, talajból származó klorit/vermikulit, vermikulit) vetettek alá nedvesítési-kiszáradási ciklusoknak és vizsgálták az ásványtani, kristályszerkezeti és kémiai jellemzőket. Kimutatták, hogy a nedvesítési-száritási ciklusok számának előrehaladtával, kb. 40-60 ciklus után az agyagásványok jelentős változásokon mennek át: csökken a szemcseméretük, a rétegvastagságuk, szerkezetükben fixálódnak egyes nehézfémek (pl. ólom), csökken a megkötött káliumtartalom és romlik a duzzadóképeség.

A talaj-nehézfém kapcsolat mélyreható vizsgálatának eredményei megkönnyíthetik a szennyezések pontos elkülönítésének, lehatárolásának és viselkedésének megértését. Az eredmények fontos adatokat szolgáltattak hulladéktárolók agyag védőrétege fejlődésének, változásának valamint talajok környezetszennyezőkkel szembeni pufferkapacitásának megismeréséhez is. Az eredményeket 4 fős kutatócsoport érte el, ebből 2 fő volt a GKKI alkalmazottja.

*A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 2,3 M Ft volt, további 1,6 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.*

A paleoklíma- és környezet-rekonstrukciós kutatásaik keretében jelentősen módosították a gerescei és budai-hegységi édesvízi mészkövek keletkezési idejéről, paleohidrológiájáról, a Duna-teraszokkal való kapcsolatáról eddig alkotott képet. Az elvégzett stabilizotóp-geokémiai és korvizsgálatoknak köszönhetően lehetőség nyílt a mészkövek képződése során fennálló éghajlati viszonyok pontosabb rekonstrukciójára is. A pamukkalei (Törökország) édesvízi mészkő előfordulások vizsgálatának eredményei fontos információkat szolgáltattak a hazai (aktívan már nem képződő) édesvízi mészkövek vizsgálatához. Az Egerszalók közelében található Demjén-42-es kútból kifolyó termálvízből az elmúlt évtizedek során jelentős vastagságú édesvízi mészkőösszlet vált ki. A képződményen folytatott geokémiai vizsgálatok eredményeinek nemzetközi folyóiratban történő publikálása nem csak olyan nagy jelentőségű általános következtetések bemutatását tette lehetővé, amelyek pl. a paleohőmérsékleti számításoknál fontos szerepet játszhatnak, hanem magára a képződményre is felhívta a figyelmet.

Barlangi képződmények (cseppkövek) uránsorozatos kormeghatározásával tovább pontosították az előző években kimutatott klíma- és környezetváltozások időbeli felbontását. Az elmúlt kb. 2500 év során képződött (szub-recens), a Kiskötháti-zombolyból származó cseppkőminta nyomelem-geokémiai vizsgálatát historikus forrásokkal és a jellemzően néhány évszázadra visszanyúló faévgyűrű adatsorokkal összevetve rekonstruálták az elmúlt évezred klíma és környezeti változásait. A cseppkövek képződéséhez hozzájáruló barlangi csepegő víz és a kicsapódó karbonát izotóparányainak összevetése érdekében tovább folytatódott egy kijelölt budai barlang csepegő vízmintáin az oxigén és hidrogénizotóp értékek meghatározása. Eredményeik szerint a mintázási pontok között tapasztalható különbségeket a beszivárgási zónák közötti eltérések okozhatják, illetve (feltételezhetően) az urbánus környezetben tapasztalható antropogén hatások (vízszivárgások).

Tovább vizsgálták a balatoni kagylóhéjak (*Pisidium* sp., *Valvata* sp.) stabilizotópos jellegeit a tó nagyléptékű környezeti változásainak nyomon követéséhez.

A Kárpát-medencebeli klímarekonstrukció újabb módszerekkel történő kiegészítése jelentősen hozzájárulhat a tudományos alapokra épülő, egyre pontosabb klímaváltozási forgatókönyvek megalkotásához. A téma által a társadalom körében kiváltott érdeklődést jelzi, hogy az intézet nagy sikerű ismeretterjesztő rendezvényt szervezett a Magyar Természettudományi Múzeumban „Jégkorszaki Búcsú” címmel. A fenti paleoklíma- és környezet-rekonstrukciós vizsgálatokat 16 fős kutatócsoport végezte el, ebből heten a GKKI alkalmazottai.

*A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 1,6 MFt volt, további 4,6 MFt volt pályázati forrásból elnyert összeg.*

*Vízgeokémiai kutatásaik* során folytatták a Budapest környéki hévizek stabilizotóp-geokémiai vizsgálatát az oldott komponensek eredete meghatározása céljából. Ezek a hévizek ugyanis a beszivárgási terület vizeihez képest kiemelkedően sok oldott szabad és kötött széndioxidot tartalmaznak. Ez csak úgy lehet, hogy a mélyben áramló vízbe széndioxid oldódott be, ami lehetővé tette nagyobb mennyiségű karbonátos kőzet (mészkö, dolomit) beoldását. Hazai együttműködésben kimutatták, hogy a többlet széndioxid metamorf folyamatokból származik (a modellezett többlet széndioxid  $\delta^{13}\text{C}$  értéke  $+3$  [‰]<sub>VPDB</sub> körüli), ami feltételezhetően egy üregben csapdázódott és onnan oldódik folyamatosan a vízbe.

Engedélyezési és üzemeltetési szempontjából rendkívül fontos a vízáramlást leíró hidrodinamikai modell megbízhatósága, pontossága, hiszen ezen alapszik a hévizek hosszú távú kitermelhetősége, valamint a víz minőségének biztosítása. A kapott eredményeknek a terület hidrodinamikai modelljébe való beépítése javítani fogja a modell pontosságát, ezen keresztül pedig a hosszú távú tervezhetőséget. A vízgeokémiai kutatásokban 8 fő vett részt, ebből 2 a GKKI alkalmazottja.

*A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 4,3 MFt volt, további 3,8 MFt volt pályázati forrásból elnyert összeg.*

*A hazai hévizek szervesanyag-tartalmának vizsgálata* körében a hévizek huminsav- és fulvosav-tartalmának eredetét tanulmányozták. Az eddigi eredményeink arra utalnak, hogy az aromás szénhidrogének legvalószínűbb forrásai ezek a komponensek lehetnek a hévizekben. Vizsgálták továbbá a humin- és fulvosavak összetételét, becsülték a molekulasúlyok és atomszámok eloszlását. Az oxigénatomok relatív gyakorisága alapján jellegzetes eltérést mutattak ki a huminsav és a fulvosav között. Ezt a különbséget az elemi összetételek és a legfontosabb funkciós csoportok is alátámasztják, azaz a fulvosavnak nagyobb az oxigéntartalma és karbonil-gazdagsága. Mindkét komponens esetén megfigyelték a molekulasúly (és a szénatomszám) csökkenését a hőmérséklet emelkedésével a 46–92°C tartományban. Ez hasonlít ahhoz a korábbi megállapításhoz, hogy több homológ soron (aromás/heteroaromás szénhidrogének, fenolok stb.) belül az emelkedő hőmérséklettel csökken a nagyobb szénatomszámú tagok relatív koncentrációja a kisebbek javára (a rövidebb szénláncúak aránya nő), vagyis demetileződés játszódik le. Ez arra utal, hogy feltételezésük, mely szerint a kisméretű aromás vegyületek megjelenése a forró hévizekben (80°C felett) nagyobb humin anyagok lebomlása során jött létre, nevezetesen a kolloid/oldottállapotú humin/fulvosavak degradálódása során, helytálló. Jelenlegi ismeretek szerint a lehetséges reakció a hidrolitikus diszproporcionáció: a szerves anyag (pl. a kolloidállapotú huminsavak)

degradálódása a víz aktív részvételével megy végbe, miközben kisebb, vízben jobban oldódó szerves molekulák és széndioxid keletkeznek. A nitrogénatomok esetében a fulvosavak nitrogénben jellegzetesen szegényebbek, mint a fulvosavak. Ez a fulvosavak részleges huminsav eredetére utalhat.

A fenti vizsgálatok alapvető fontosságúak a hévizek minősítése szempontjából. Ezek a képződmények turisztikai vonzerejük révén számos régió legfontosabb gazdasági lehetőségét képviselik. Az eredményeket 4 fős kutatócsoport érte el, ebből 2 fő volt a GKKI alkalmazottja.

*A kutatásokra fordított összeg intézeti részről 8,4 MFt volt, további 3,4 MFt volt pályázati forrásból elnyert összeg.*

A *kulturális örökség vizsgálata* témakörben módszertani fejlesztést végeztek a műemléki építőanyagok szilárdítására használt kovasavészter típusú kőszilárdítószer vizuális kimutatására. Az építőanyagok vizsgálatában hagyományosan használatos polarizációs és pásztázó elektron-mikroszkópiát jól kiegészíti a katódlumineszcens mikroszkópia, mivel a kőzetek pórusaiban a szilárdítószerből kivált kovagél – amelynek a kőzetszemcsék összekötése a feladata – lumineszcens tulajdonságokkal bír. Ezáltal a különféle mikroszkópos módszerek kombinálásával lehetővé válik a kovasavészter típusú szerek szilárdítási hatékonyságának vizsgálata, és a szilárdítás folyamatának jobb megértése. Fosszilis csontanyag DNS vizsgálatának optimalizálásához XRD rendezettségi vizsgálatokon alapuló módszert vezettek be az MTA Régészeti Intézetével fennálló Együttműködési megállapodás keretében.

A Reneszánsz Év keretében az Iparművészeti Múzeumban rendezett „Beatrix hozománya” c. kiállítás egyik legjelentősebb tárgyának restaurálását előkészítő archeometriai vizsgálatokkal bizonyították a tárgy eredeti funkcióját. Elvégezték a tárgy részletes anyagtudományi feldolgozását, eredményeik bekerültek a kiállítás angol nyelvű katalógusába. Ez utóbbi első a magyarországi múzeumi gyakorlatban.

A Kulturális Örökségvédelmi Szakszolgálat ásatási leletein Magyarország első szisztematikus grafitos kerámia kutatásában vettek részt. Dunaszentgyörgy és Bátaszék lelőhelyről előkerült kelta korú leletek vizsgálatával kimutatták, hogy a grafitos és a nem grafitos kerámiák alapanyaga azonos, csak a készítésekor alkalmazott grafitos soványító anyag import. A grafitos kőzetanyag ásványos és geokémiai összetétele alapján dél Cseh-masszívum eredetű, valószínűleg Cesky Krumlov környékéről származik. A fenti eredmények arra engednek következtetni, hogy a kelták kiterjedt kereskedelmi szövetséggel rendelkeztek.

Az Intézetben folyó archeometriai kutatás elismerésének könyvelhető el, hogy az MTA X. osztálya Geokémiai, Ásvány-Kőzettani Tudományos Bizottsága engedélyezte az Archeometriai Munkabizottság megalakítását. A munkabizottság létrehozását a GKKI Archeometriai kutatócsoportja tagjai kezdeményezték, titkárául pedig az Intézet egyik főmunkatársát választották.

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 kulturális örökség vizsgálatának eredményeit 5 fős kutatócsoport érte el, ebből hárman a GKKI alkalmazottjai.

*Az intézeti ráfordítás 9,1 MFt volt.*

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

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

Ebben a témakörben hivatalos nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn TÉT pályázatok keretében a zágrábi egyetemmel (Horvátország), továbbá a granadai és a jaeni egyetemekkel (Spanyolország). A 2007-ben indult horvát-magyar együttműködés elsődleges célja a Medvednica- és a Szlavóniai-hegység metamorf fejlődéstörténetének vizsgálata. Az együttműködés keretében a Szlavóniai-hegység egyes nagyon kistektonikus metamorf kőzetsorozatainak K-Ar kormeghatározás történetét, melynek segítségével lehetővé vált a kőzetátalakulás időbeli elhelyezése és az Alp-Kárpát-Dinári-Pannon-térség nagyszerkezeti modelljébe való beillesztése. A 2007-ben indult spanyol-magyar együttműködés elsődleges célja az antropogén folyamatok során és a diagenézis, a talajképződés eredményeként kialakuló rétegszilikát-átalakulások nyomon követése transzmissziós elektron-mikroszkópos és röntgen-pordiffrakciós módszerek együttes alkalmazásával. A projekt keretében a kutatók az illit-dioctaéderes csillám átalakulásokat vizsgálják különös tekintettel a filloszilikátok rétegek közötti terében bekövetkező változásokra.

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

A magmás kőzetan-geokémiai kutatásaikat a hazai kutatóhelyek közül a Természettudományi Múzeummal, az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel valamint az MTA-ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoportjával együttműködésben végezték. A témakörben informális nemzetközi kutatási kapcsolatot tartottak fenn a bécsi Naturhistorisches Museum-mal, a lausanne-i egyetemmel, továbbá az University of Manitoba-val.

A hazai ásványi nyersanyagok kutatása sokrétű informális hazai és nemzetközi együttműködés keretében folyt. Magyarországon elsősorban az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel, a Magyar Állami Földtani Intézettel, a Szegedi Tudományegyetemmel és a Kaposvári Diagnosztikai Központtal működtek együtt. Az Amerikai Geológiai Szolgálattal, az Orosz Tudományos Akadémiával, a Kanazawa Egyetemmel (Japán), a müncheni Ludwig-Maximilians Egyetemmel, az ausztráliai Monash University-vel, a Freiburgi Bányászakadémiával és a lyoni Claude Bernard Egyetemmel (Franciaország) informális nemzetközi együttműködést folytattak.

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

A paleoklimatológiai tanulmányok elsősorban az Eötvös Loránd Tudományegyetem, a Természettudományi Múzeum, a Szegedi Tudományegyetem, a Magyar Állami Földtani Intézet, és a Régészeti Intézet munkatársaival közös kutatómunka keretében folytak. Magyar-török TÉT pályázat keretei között folyik együttműködés a denizli Pamukkale University-vel az édesvízi mészkövek kutatása kapcsán. További informális kapcsolatot tartottak továbbá a hannoveri Leibniz Institute for Applied Geosciences (Németország), az University of Taipei (Tajvan) és a tartui egyetem kutatóival.

Vízgeokémiai kutatásaikat az Eötvös Loránd Tudományegyetem, a Magyar Állami Földtani Intézet, a VITUKI Kht, valamint a GWIS Kft. munkatársaival együttműködve végezték. Kutatásaik során nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn a lublini Maria Curie-Skłodowska Egyetemmel, a denizli Pamukkale University-vel és svájci ETH munkatársaival.

A hévizek szerves anyagainak vizsgálata során a Magyar Állami Földtani Intézettel, a Szegedi Tudományegyetemmel, az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel és az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével működtek együtt. További informális nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn a wroclavi, a manchesteri és a newcastlei egyetemekkel, valamint a müncheni Helmholtz Zentrum-mal.

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

Az intézet egy kutatója az International Association of Geochemistry and Cosmochemistry, valamint az International Union of Geological Sciences Magyar Nemzeti Bizottságának titkára. Egy további kutató az utóbbi bizottság tagja. Az intézet kutatói részt vesznek az European Science Foundation értékelő bizottságának az IUGS Subcommission on Systematics of Metamorphic Rocks munkájában, az albizottság tagjaként és a Very low-grade metamorphic rocks nemzetközi munkacsoport vezetőjeként. Az intézet egy munkatársa tagja az International Eclogite Conference Tanácsának, egy további kutató pedig az IUGS INHIGEO, a Nemzetközi Földtani Bizottság tagja. Egy kutató a European Society for Isotope Research (ESIR) pénzügyi ellenőrző bizottság tagja. Egy másik kutató a European Society for Isotope Research tanácsadó testületének tagja.

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

Egy-egy kutató tagja az Acta Geologica Hungarica, valamint az Acta Mineralogica et Petrographica folyóiratok szerkesztő bizottságának. Egy kutató tagja volt a Pávai-Vajna

Ferenc emlékkonferencia és a Magyarország termál- és gyógyvizei múltja, jelene, jövője című konferencia szervező bizottságának.

Oktatási részvétel: 1 fő egyetemi magántanár a Szegedi Tudományegyetemen, földtudományi szakon; 1 fő az SZTE Doktori Iskolájának tőrzstagja; 1 fő az Eötvös Loránd Tudományegyetem Habilitációs Bizottságának tagja; 1 fő az egyetem Doktori Iskolájának tőrzstagja. Hét kutató vesz részt az egyetemi alapképzésben az Eötvös Loránd Tudományegyetemen, a Szegedi Tudományegyetemen, a Pécsi Tudományegyetemen, a Nyugat-Magyarországi Egyetemen valamint a Képzőművészeti Egyetemen. Az intézet egy kutatója 2008-ban előadókörúton vett részt az Osztrák Ásványtani Társulat meghívására a bécsi, a grazi és a leobeni egyetemeken.

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

A beszámolási évben a GKKI kutatói 7 OTKA-pályázatban voltak témavezetők, háromban szerepeltek alvállalkozóként, további 1 pályázatban résztvevőként.

Az intézet kutatói a tárgyévben két OTKA-pályázaton nyertek, amelyek 2009-ben indulnak. Az intézet egy kutatója 2009-től hazai koordinátora a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség által támogatott „Using Environmental Isotopes for Evaluation of Streamwater/Groundwater Interactions in Selected Aquifers in the Danube Basin” című projektnek. A projekt lehetőséget biztosít egy új izotóparány-mérő lézerspektrométer beszerzésére is.

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

1. Demény A, Siklósy Z: Combination of off-line preparation and continuous flow mass spectrometry: D/H analyses of inclusion waters. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* 22: 1329–1334 (2008)
2. Kele S, Demény A, Siklosy Z, Németh T, Tóth M, Kovács M.B: Chemical and stable isotope composition of recent hot-water travertines and associated thermal waters, from Egerszalok, Hungary: Depositional facies and non-equilibrium fractionation. *Sedimentary Geology* 211: 53–72 (2008)
3. Koroknai B, Árkai P, Horváth P, Balogh K: Anatomy of a transitional brittle-ductile shear zone developed in a low-T meta-andesite tuff: A microstructural, petrological and geochronological case study from the Bukk Mts. (NE Hungary). *Journal of Structural Geology* 30: 2; 159–176 (2008)
4. Sipos P, Németh T, Kovács Kis V, Mohai I: Sorption of copper, zinc and lead on soil mineral phases. *Chemosphere* 73: 461–469 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Geokémiai Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	33	Ebből kutató <sup>2</sup> :	18
PhD, kandidátus:	9	MTA doktora:	2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
			9
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			32
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			30
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	14
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	6	idegen nyelven:	8
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	28,733	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	308
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			225
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	16	posztterek száma <sup>10</sup> :	25
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	3
			208
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			152 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	3	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	65,7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			10
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	22,2 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,8 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			37
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	38,6 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## IZOTÓPKUTATÓ INTÉZET

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

Telefon: 392-2531, Fax: 392-2533

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

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

Az intézet 2008. évi terve az elvégzendő feladatokat az Alapító Okiratban megjelölt alaptevékenységek fő irányai szerint négy csoportba sorolta.

A nukleáris analitikai módszerek alkalmazása és fejlesztése terén elsősorban a prompt gamma aktivációs analízis (PGAA) módszerének fejlesztése, alkalmazási körének bővítése és művelése volt a kijelölt feladat, valamint a Mössbauer-spektroszkópia mérési módszerének továbbfejlesztése és alkalmazása.

*A nukleáris anyagok és izotópjaiak kimutatása és mennyiségeik meghatározása terén is elsősorban a mérési módszerek továbbfejlesztése, érzékenységük növelése volt a kitűzött feladat. Ez a munka szorosan kapcsolódik a nemzetközi nukleáris biztosítéki rendszer hazai megvalósítása feltételeinek biztosításához.*

*A sugárzások hatásainak vizsgálata, dozimetria terén egyrészt polimerizációkinetikai vizsgálatok végzése, kompozit polimerek tulajdonságainak javítása, valamint peszticid molekulák bomlásának vizsgálata sugárzás hatására, másrészt dozimetriai célra használható új anyagok előállítása és vizsgálata, továbbá a módszer új (nukleáris biztosítéki) alkalmazási lehetőségének felderítése volt a kijelölt tevékenység.*

*A katalizátorok és katalitikus folyamatok vizsgálata terén a régebben folyó eredményes kutatások folytatása volt a cél, így a fém/fém-oxid hatások tanulmányozása arany katalizátorokon, PROX és kétfémes (módosított) katalizátorok jellemzése és katalitikus tesztelése, az eredmények értelmezése.*

Folyamatos, az intézet Alapító Okiratában rögzített feladat a szakhatóságok (Országos Atomenergia Hivatal) számára végzett szakértői tevékenység, mely esetenként meghatározott célfeladatok teljesítését, az országos sugárzóanyag- és nukleáris anyag-nyilvántartás működtetését, ill. az ellenőrző módszerek fejlesztését jelenti. E területen fontos feladat volt a paksi erőmű 2003-as üzemzavara során megsérült, újratokozott üzemanyaga nukleáris anyagtartalmának meghatározása, amely munka 2008-ban fejeződött be.

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

2008-ban elért *különösen kiemelkedő eredményként* egy, az alapkutatás, és egy, a módszerfejlesztés terén elért eredmény jelölhető meg (erről a két eredményről készült külön ismertetés is).

- Az alapkutatási eredményt a Pd katalizátorok felület közeli rétegeiben reakciók közben lejátszódó szerkezeti változások és a reakciók kapcsolatának vizsgálatában érték el.



Kimutatták, hogy a Pd katalizátorok attól függően hidrogéneznak szelektíven, vagy kevésbé szelektíven telítetlen hármass kötések, hogy a felület közeli rétegekbe kis mennyiségű szén, vagy hidrogén épült be. Az eredményeket a berlini Fritz-Haber Institut kutatóival közösen érték el. A vonatkozó méréseket *in operando* körülmények között, szinkrotronos gerjesztésű, „nagy” (1 torr) nyomású XPS készülékben (BESSY, Berlin), ill. speciális kialakítású PGAA mérőcellában, valamint katalitikus cirkulációs reaktorban végezték (IKI). Az eredményekről több közleményben, köztük egy Science publikációban számoltak be.

- A módszerfejlesztési eredményt ismeretlen eredetű nukleáris minták karakterizálása terén érték el. A hagyományos roncsolásos ICP-MS módszereket továbbfejlesztve új, a nukleáris törvényszéki analitikában eddig nem alkalmazott kvázi-roncsolásmentes, lézeralblációs (LA-ICP-MS) módszereket dolgoztak ki lefoglalt urán-oxid üzemanyag tabletták izotóp-összetételének és gyártási idejének meghatározására, amelyek lényegesen gyorsabbak az eddig elterjedten használt roncsolásos tömegspektrometriai eljárásoknál. A módszer nagy előnye, hogy a vizsgálathoz nem szükséges a minta roncsolása, ami törvényszéki minták esetén döntő jelentőségű. A kifejlesztett módszer segítségével meghatározható lefoglalt hasadóanyagok eredete, gyártási helye. Az eljárás alkalmazása segíti a nukleáris anyagok illegális forgalma elleni küzdelmet, növeli a nukleáris biztonságot. A módszer továbbfejleszhető mikrométer méretű szennyezések nukleáris törvényszéki vizsgálatához. A módszerek alkalmazhatóságát bemutatták egy korábban lefoglalt, 4,4 %-os dúsítású reaktor-fűtőelem tablettá teljes körű karakterizálása során, melyet az említett ICP-MS, valamint gamma-spektroszkópiás módszerrel végeztek.

Az intézet tevékenysége 2008-ban is, hasonlóan az azt megelőző két-három évhez, két fő jellegzetes irányban tovább erősödött és válik egyre inkább jellemzővé:

- *A hideg neutronos prompt gamma aktivációs analízis (PGAA) mérési módszer továbbfejlesztése, alkalmazási lehetőségeinek szélesítése.* Ez jól tükröződik abban is, hogy a Budapesti Neutron Centrum keretében működő PGAA mérőhely mérési kapacitása kb. 1/3-a különböző hosszabb távú többoldalú EU-s projektek számára van előre lekötve és a tervezett munkák a projektek szerves részeit képezik.
- *A nukleáris anyagok kimutatási módszereinek továbbfejlesztése.* Ez a tevékenység két fő mérési módszerre épül, a nagyérzékenységű, lézer ablációs ICP-MS, valamint alacsony háttérű gamma-spektroszkópiái módszerek továbbfejlesztésére, alkalmazási módszereik szélesítésére. Az utóbbi tevékenység az egyik azok közül, amelyek az Országos Atomenergia Hivatal részére végzett intézeti szakmai háttértevékenységet megalapozzák.

A jelentősebb további eredmények ismertetése a bevezető, I. részben felsorolt tématerületek szerint csoportosítva következik.

#### *A nukleáris analitikai módszerek továbbfejlesztése és alkalmazása terén*

#### A PGAA módszerét továbbfejlesztették, és az alábbi magfizikai és nukleáris analitikai vizsgálatokban alkalmazták

- Hideg neutronnyalábban mérték a Ni, Ru, Zn, Pt, Rh, Mg, Hg, K, Sb, Bi, Mo, Li, In, Sc, Sr, Te, Ta, P, Zr, Rb, F, Fe, Na elemek sugárzási spektrumait, valamint a V és Se bomlási csúcsainak mérését nyalábszagatásos módszerrel standardizálták,

- Meghatározták Fe-54 és U-235 izotópok neutronbefogási hatáskeresztmetszeteit, az utóbbi izotópnál a hasadási neutronok szögeloszlását, továbbá a Ru-101 izotóp befogási gammasugárzását.

#### A PGAA módszerét sikerrel alkalmazták archeometriai vizsgálatokban:

- Csiszolt kőeszközök és szerszámkövek, obszidián és radiolarit pattintott kőeszközök, mezopotámiai hematit pecsétnyomók, egyiptomi piramis mészkő építőanyagának, valamint vörsi kerámiák nyersanyaglelőhelyeinek azonosítására.
- Középkori angol sírfeliratok bronz betűinek összetétel meghatározására.
- Foszfor mennyiségi meghatározására 7. századi vas kardok anyagában a készítés technológiájának felderítésére.

#### A PGAA módszerét geológiai vizsgálatokban is eredményesen alkalmazták:

- Vulkáni, üledékes és metamorf kőzetminták (sziléziai, új-zélandi, és argentin eredetű bazalt, mátrai andezit, grano- és mikrodiorit, lösz, xenolit, lamprophire stb.) elemi összetételének meghatározására,
- Kondrit meteoritok és gyémántok elemi összetételének vizsgálatára, forrásaik azonosítására.

A PGAA módszerét *anyagtudományi* vizsgálatokban is alkalmazták katalizátorok (Ni-P-S, Au/CeO<sup>2</sup>, Au/TiO<sup>2</sup>, Pd(Ga), Pt black) pontos összetételének meghatározására, nyomelemek (pl. 100 ppm urán) kimutatására, bronz és dohány sztenderdek, valamint környezeti minták (fakéreg, hamu) elemzésére.

A NIPS (Neutron Indukált Prompt gamma Spektroszkópiás) berendezéssel tokozott urán, valamint régészeti mintáknál germán eredetű övcsat és korong fibula neutron radiográfiás mérését végezték el, nagy tisztaságú Au, In, Gd, Dy lemezek neutronabszorpcióját határozták meg.

#### A Mössbauer-spektroszkópia módszerét alkalmazva

- Ferriszilikát katalizátorokon végzett *in situ* mérésekkel megállapították, hogy kisebb hőmérsékleten (<300 °C) a dinitrogén oxid bontásában a kisebb oxidációs fokú Fe<sup>2+</sup> állapot stabilis, míg nagyobb hőmérsékleten (< 400 °C) vegyes Fe<sup>2+</sup>-O-Fe<sup>3+</sup> centrumok is katalizálhatják a reakciót.
- Megállapították, hogy a Bodai Agyagkőzet mállási folyamatai a réteg felső 10 m-es zónájában játszódnak le, és jól követhetők a rétegszilikát ásványokban a Fe<sup>2+</sup>/Fe<sup>3+</sup> arány változásának mérésével.

*A nukleáris analitikai módszerek alkalmazásával és továbbfejlesztésével az intézet tíz kutatója foglalkozik, a becsült munkaidő ráfordítás 8 kutatóév, az összes ráfordítás 86 MFt, ebből pályázati forrás 44 MFt.*

*Nukleáris anyagok és izotópjaik kimutatása, mennyiségeik meghatározása terén*

#### Gamma spektrometriai és neutron mérési módszerek továbbfejlesztése során

- Nagy neutronhozamú források gyorsabb és pontosabb mérésére módszert dolgoztak ki a digitális holtidő csökkentésével. Sokcsatornás készüléket fejlesztettek ki a neutron-koincidencia mérési eredmények ún. lista módú rögzítéséhez. A rögzített impulzussorozatok visszajátzásához a NAÜ támogatói programja keretében készült egy visszajátzó készülék, mellyel a valódi mérés szimulálható, és mérési gyakorlatoknál, oktatási céllal szemléltetésként alkalmazható.
- Meghatározták a sérült nukleáris üzemanyagot tartalmazó 72 db tok hasadóanyag-tartalmát (U-235, össz-U, Pu). Szoftvert fejlesztettek ki a paksi újratokozott sérült üzemanyag-mérésekből származó, kb. 35 ezer adatállományból álló adathalmaz kezelésére. A szoftvert eredményesen alkalmazták a sérült nukleáris üzemanyagot tartalmazó tokok hasadóanyag-tartalmának meghatározását célzó mérések kiértékelésénél a Paksi Atomerőműben. Az ennek alapján készült nukleáris-anyag készletváltási jelentést a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (NAÜ) elfogadta. A Paksi Atomerőmű sérült üzemanyagát tartalmazó tokok hasadóanyag-tartalmának meghatározása szakmailag úttörő jellegű, nagy volumenű és gazdasági kihatásaiban is jelentős munka volt, melyet érvényben levő nemzetközi (atomsorompó) szerződés teljesítése miatt kellett elvégezni.
- Periódikusan ki-bekapcsolható, impulzus-üzemű izotópos neutronforrás fejlesztéséhez módszert dolgoztak ki Am-241 alfa-forrás felvitelére az elkészült kísérleti berendezés lemezeire elektrolizálással.

*A gamma- és neutronspektroszkópiai vizsgálatokkal 7 fős intézeti kollektíva foglalkozik, a felsorolt eredményeket 5 kutatóév munkával érték el. Az intézeti ráfordítás kb. 105 MFt volt, ebből 25 MFt a pályázati ráfordítás.*

Környezeti, illetve. biztosítéki egyezmény keretében vett minták elemzésére alkalmas módszerek fejlesztése terén a környezetben igen kis mennyiségben előforduló urán és transzurán elemek (plutónium és amerícium) meghatározására alkalmas módszereket dolgoztak ki. A kifejlesztett ICP-MS detektáláson alapuló eljárásokkal a vizsgált elemek és izotópjaik az általánosan használt radioanalitikai módszereknél gyorsabban és alacsonyabb kimutatási határral határozhatók meg. A kifejlesztett módszerekhez kapcsolódó modelleket dolgoztak ki, amelyekkel megbecsülhető a transzurán-szennyezés eredete és kibocsátási ideje. Az eljárásokkal megadható a környezeti mintákban levő szennyezés típusa (például reaktor-eredetű vagy atomfegyver-kísérletből származó kibocsátás) és ezek részaránya, illetve lehetőség van a kibocsátási idő becslése révén az eredet pontos felderítésére (például egy esetleges új keletű kibocsátás megkülönböztetésére a korábbi szennyezésektől). A kidolgozott módszereknek kiemelt jelentősége van a hazai környezeti és nukleáris biztonsági ellenőrzésben, valamint a nem-deklarált nukleáris tevékenységek felderítésében.

*A nagyérzékenységű ICP-MS vizsgálatokkal az intézet öt kutatója foglalkozik, a (bevezető részben is) felsorolt eredményeket 3 kutatóév munkával érték el. Az intézeti ráfordítás 50 MFt, ebből 25 MFt a pályázati forrás.*

A Bodai Aleurolit Formációból származó kőzetmintákon hosszú felezési idejű radioizotópot tartalmazó anionos specieszekkel ( $^{99}\text{TcO}_4^-$ ,  $\text{H}^{14}\text{CO}_3^-$ ) és triciált vízzel (HTO) végeztek izotópmigrációs vizsgálatokat. Megállapították, hogy a kőzet ásványi összetételének kisebb eltérései nem befolyásolják jelentősen az anionos specieszek migrációját. Kimutatták, hogy a víz öndiffúziója a kőzetmintákban kb. egy nagyságrenddel gyorsabb, mint az anionos formájú

specieszeké. A vizsgálatoknak a kiégett atomerőművi fűtőelemek végleges elhelyezésének kiválasztásával kapcsolatban van gyakorlati jelentősége.

*Izotópmigrációs vizsgálatokkal az intézet három kutatója foglalkozik, a felsorolt eredményeket 1 kutatóév munkával érték el. Az intézeti ráfordítás 12 MFt, ebből pályázati forrás 6 MFt.*

*Sugárzások hatásainak vizsgálata, dozimetria terén*

#### Sugárzások hatásainak vizsgálata során

- A polimerizáció kinetikai vizsgálatok területén lezárták a maleinsav és fumársav reakciójának vizsgálatát elektrofil gyökökkel, az eredményekről közleményt jelentettek meg.
- A cellulóz polimer kompatibilitásának javítása céljából 2-etil-hexil-metakrilát (EHMA), illetve 2-etil-hexil-akrilát (EHA) monomert ojtottak pamut cellulózra és cellulóz linterre (rövid szálú cellulóz). Az egyidejű ojtás módszerét alkalmazva mindkét monomer esetében (metanolos oldatban) azt tapasztalták, hogy az ojtási hatékonyság a dózissal lineárisan nőtt a 2-40 kGy dózistartományban. A maximális ojtási hatékonyság ~140% volt EHMA és ~103% EHA esetében (40 kGy dózist alkalmazva). A minták vízfelvevő képessége 40% ojtási hatékonyságig csökkent, ezután nem változott. Az ojtott cellulóz linterrel polipropilén kompozit próbatestek készültek, amelyekről SEM felvételek, valamint szakító vizsgálatok alapján megállapították, hogy a cellulóz polimer kompatibilitását az ojtás jelentősen javította.
- A nagyenergiájú sugárzással történő szennyvízkezelés témakörben az Acid Red 1 színezék vizes oldata sugárzásos elbontásának kinetikai vizsgálatát végezték. Megállapították, hogy ellentétben a korábbi elképzelésekkel, a szuperoxid gyökion és perhidroxil gyök – bár viszonylag kis mértékben – de hozzájárul a lebontáshoz. A munka alapján publikáció készült.

*A sugárzások hatásaival kapcsolatos kutatásokkal az intézet öt kutatója foglalkozik. A felsorolt eredményeket 3 kutatóév munkával érték el. Az intézeti ráfordítás 30 MFt volt, ebből 10 MFt a pályázati forrás.*

#### A dozimetriai kutatások területén

- Megvizsgálták az újonnan szintetizált európiummal aktivált bárium tetraborát kétféle struktúrájú (amorf és polikristályos) alakjának optikai abszorpció, és fotolumineszcencia tulajdonságait, ezeknek az aktivátor koncentrációjától való függését. Megállapították, hogy mindkét szerkezetbe  $\text{Eu}^{3+}$  -ként épült be az aktivátor. Továbbá meghatározták különféle aktivátorokkal (Cu, Eu) szennyezett litium tetraborát mintákban a csapdába fogódás hatásfokát relatív RL-TL hozam mérésével. Megállapították, hogy e hatásfok az aktivátor anyagától jelentősen, míg adott aktivátor esetén annak koncentrációjától kevéssé függ. Különböző összetételű  $\text{CaSO}_4\cdot\text{Tm,Cu}$  minták vizsgálata során megmérték a csapdába fogódás hatásfokát. Ennek alapján javaslatot tettek új Tm-Cu arányú, valószínűleg még kedvezőbb dozimetria tulajdonságú anyag elkészítésére.
- Folytatták a KFKI telephelyi *környezeti dozimetriai* vizsgálatokat TL doziméterek alkalmazásával. A szabadban mért dózisteljesítmények a telephely egy pontján sem

haladták meg az átlagos természetes háttér értékét (mindenütt 2  $\mu\text{Gy/h}$  alattiak a mért értékek). Az eredmények célszerűen felhasználhatók lakossági tájékoztatásra is.

- *Retrospektív dozimetria illicit és safeguards célú alkalmazási lehetőségeit* bemutató tanulmányt készítettek. *Az alkalmazás lehetősége azon alapszik, hogy a környezetben megtalálható egyszerű tárgyak általában tartalmaznak olyan összetevőket, amelyek természetes dózismérőként viselkednek.* A retrospektív dozimetriai módszerek alkalmazásával nyomon lehet követni a sugárzó/nukleáris anyagok illegális forgalmát, bizonyítani lehet az esetleges illegális tárolás tényét, amely segíthet az atomenergia biztonságos alkalmazásának hatósági ellenőrzésében.
- *Sugártechnológiai dozimetriai kutatások* során kidolgozták a korábban kifejlesztett, elektrongyorsító berendezések elektron energiájának mérésére szolgáló eszköz gyakorlati alkalmazási körülményeit ipari nagyenergiájú berendezéseknél, továbbá OSL alapú Sunna doziméter film alacsony hőmérsékleti-, és egyéb különféle alapanyagok OSL alkalmazhatósági körülményeit határozták meg.

*A dozimetriával kapcsolatos kutatásokkal négy intézeti kutató foglalkozik. A becsült munkaidő ráfordítás 2 kutatóév. Az intézeti ráfordítás 22 MFt volt, ebből pályázati támogatás 6 MFt.*

#### Katalizátorok és katalitikus folyamatok vizsgálata terén

Különböző vastagságú (0.12-1.5 nm) Pd héjat szintetizáltak 5 nm-es Au magra. A Pd héj epitaxiális növesztése növelte az (111) lapok távolságát a Pd héjban, s az Au-ra jellemző d(111) értékeket észleltek. A hordozós Pd-Au/SiO<sub>2</sub> katalizátoron a Pd héj vastagságának csökkentése növelte az acetilén hidrogénezésének sebességét. Optimális aktivitást és szelektivitást a 68-80 at% Pd-ot tartalmazó homogenizált szemcséken kaptak.

Különböző módon készített Au/TiO<sub>2</sub>, Au/SiO<sub>2</sub> és Au/Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátorokon nyomnyi (0,11%, 0,11 kPa) acetilén hidrogénezését vizsgálták. Az Au katalizátorok lényegesen kisebb aktivitást mutattak, mint a Pd tartalmúak, viszont az előbbieken még nagy hidrogén feleslegben is (H<sub>2</sub>/C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>=140, T<473 K) az etilén képződés szelektivitása  $\approx 100\%$ . Az Au katalizátorok önmérgeződése a felületi hidrogén kis koncentrációjával értelmezhető.

Különböző módon előállított TiO<sub>2</sub>-vel promoteált mezopórusos szilikát hordozós aranykatalizátorok eltérő CO oxidációs aktivitását értelmezték a zéta potenciálok mérése alapján az egyes preparálásokban különböző elektrosztatikus kölcsönhatások miatt eltérő nagyságú aktív Au/TiO<sub>2</sub> határfelület kialakulásával. E kölcsönhatások kontrollálásával preferáltan alakítottak ki Au/CeO<sub>2</sub> és Au/MnOx határfelületeket mezopórusos SBA-15 hordozón. CeO<sub>2</sub>-dal történt promoteálás esetén nagyobb aktivitást értek el, mint a CeO<sub>2</sub> hordozós rendszerrel. Míg a CO oxidációban a promoteált Au/SBA-15 aktivitása a promotortól függően a CeO<sub>2</sub>>TiO<sub>2</sub>>MnOx>promoveálatlan irányban csökken, addig a propén teljes oxidációjában, amely az illékony szerves anyagok teljes égetésének egy modell reakciója, az aktivitás sorrend eltérő: MnOx $\approx$ CeO<sub>2</sub>>TiO<sub>2</sub> $\approx$ promoveálatlan.

Au kolloidból Au nanorészecskék sík hordozóra történő kontrollált rögzítésének kidolgozását kezdték meg későbbi szenzorikai alkalmazások céljából. Negatív felületi töltésű Au nanorészecskéket sikerült aminopropil -trimetoxi-szilánnal felületkezelt üveglemezre helyezni túlnyomórészt monoréteges szigetekbe rendeződve, de nem teljes borítottsággal.

Lézeres ablációs (PLD) és magnetronos porlasztás módszerekkel kialakított  $\text{CeO}_2/\text{Au}/\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$  modell rendszerekben az XPS vizsgálatok szerint a különböző vastagságú  $\text{CeO}_2$  rétegek, még a legvékonyabb is teljesen befedi az arany felszínét, az arany nem detektálható. A CO oxidációs mérésekből megállapították, hogy az Au filmre növesztett  $\text{CeO}_2$  réteg aktivitása nő a vastagság függvényében.

A brüsszeli ULB-egyetemmel közösen együttműködéssel keletkező Ag-oxalát/TiO-oxalát termikus bontásával különböző fémtartalmú (2, 4, 7, 10, 15 wt%) Ag/TiO<sub>2</sub> mintákat állítottak elő. Az Ag részecskék átlagos mérete az Ag-tartalom növekedésével 1-2 nm-től 10 nm-ig nő. CO oxidációban a 2% Ag/TiO<sub>2</sub> minta volt a legkevésbé aktív, míg a 10% Ag/TiO<sub>2</sub> a legaktívabb, amelynek fajlagos aktivitása meghaladja az irodalomban publikált Ag katalizátorokéit.

Reaktív kemisorpció módszerrel dolgoztak ki Ag/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátorokon az Ag felület mérésére, melyben áramlásos rendszerben 200°C-on N<sub>2</sub>O-dal képeznek az ezüst felületen egyatomos oxid réteget és mérik a N<sub>2</sub>O-ból keletkező N<sub>2</sub> mennyiségét.

#### Fém + Ga/H-ZSM-5 zeolitokon N<sub>2</sub>O jelenlétében végzett metán aktiválás során

- Ammónia lépcsőzetes termo-deszorpciójával (STD-NH<sub>3</sub>), TPR és CO adszorpció módszerekkel megállapították, hogy az impregnálással hozzáadott második fém (d-elemek: Pt, Ru) hatására a H-ZSM-5, valamint a Ga/H-ZSM-5 szerkezetében az erős savas centrumok erős redox centrumokká generálódnak.
- Az N<sub>2</sub>O bontás (CH<sub>4</sub> nélkül) 50%-os konverziójának hőmérséklete (T<sub>50</sub>) Ru/Ga/H-ZSM-5 mintán és a CH<sub>4</sub>+N<sub>2</sub>O gázkeverék reakciójának T<sub>50</sub> értéke Pt/Ga/H-ZSM-5 katalizátoron jelentősen csökken az eddig közismerten legjobb Fe/H-ZSM-5 katalizátorhoz viszonyítva.
- A dinitrogén-oxid bontásban és a dinitrogén-oxid metánnal történő redukciójában elérték, hogy eredmények megfeleljenek a szabadalmaztathatóság kritériumainak.

Ni és Ni-Au/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> mintán megvizsgálták a 30% CO<sub>2</sub> tartalmú metán száraz reformálását. A reakció 500°C hőmérsékleten indul és a körülményektől függően a konverzió teljes 800°C-on. XPS vizsgálatok azt mutatták, hogy a metán száraz reformálásában a katalizátoron nikkkel karbid és nikkkel oxidok keletkeznek. Többszöri reakció után az induló hőmérséklet növekszik, ami a felületi grafitképződésnek (nanocső) tudható be. Arany jelenlétében a grafitképződés visszaszorul.

A Poitiers-i egyetemmel együttműködésben folytatták az ott készített két-, illetve háromfémű katalizátorok (PtGe, ill. PtIr, PtIrGe) katalitikus tulajdonságainak vizsgálatát szénhidrogének (metilciklopentán, ciklohexén) reakcióiban. A legnagyobb konverziót PtIr kombinációval érték el. Az eredményekre PhD dolgozatok tézisei épülnek, ill. külön publikálásuk folyamatban van. Vizsgálták akrolein hidrogénezését kétfémű PtPd katalizátorokon. A komponensek hasonló katalitikus tulajdonságai ellenére a PtPd ötvözetkatalizátorokon markáns különbségek jelentkeztek a főtermék (telített ill. telítetlen alkohol) jellegét tekintve.

Befejeződött a H<sub>2</sub>S gáz és a tiofén kén-cserélő képességének összehasonlítása a 0,35 atomarányú Ni/MoOx/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátorral végzett mérésekben. Szignifikáns különbség állapítható meg, ami az irreverzibilis disszociatív kénhidrogén adszorpció helyek és a tiofén hidrodesszulfurálódását katalizáló helyek azonosságát mutatja a legnagyobb katalitikus aktivitású NiMoOx/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> esetében. Továbbá folytatódott a Pt-án lejátszódó tiofén

adszorpciót kísérő elektronkilépési munka változás mérésére és a felületi képződmények összetételének meghatározására irányuló Auger-spektroszkópiai vizsgálatok melyek eredményei összevethetők lesznek a fém Pt-án végzett hidrodesszulfurálási eredményekkel.

*A katalizátorok és katalitikus folyamatok témakörével az intézet 12 kutatója foglalkozik. A becsült munkaidő ráfordítás 10 kutatóév. Intézeti ráfordítás 68 MFt, ebből pályázati fedezet 20 MFt.*

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

Az intézet számos *hazai* kutatás-fejlesztési intézménnyel, egyetemmel, vállalattal van szoros kapcsolatban, ill. tart fenn együttműködést és részt vevője az ezek alapján kialakított eredményes közös projekteknek. Az intézeti tudományos publikációk kb. felének van hazai társszerzője. Az együttműködések jellegét főleg az adott szakterület szabja meg, amelyen az együttműködés történik. A nukleáris módszerek fejlesztése és alkalmazása terén az intézet partner intézete a Budapesti Neutron Centrumnak (BNC-KFKI AEKI, SZFKI, RMKI). Oktatási együttműködési szerződése van a BMGE, ill. Pannon egyetemekkel. Külön kiemelendő az Országos Atomenergia Hivatallal a nukleáris és radioaktív anyagokkal kapcsolatos hatósági feladatokat támogató tudományos-műszaki háttértevékenység tárgyában kötött határozatlan időre szóló megállapodás, mely a két intézmény együttműködésének keretét adja. A közös tudományos témák kutatására irányuló együttműködésekben jelentős szerephez jutnak az intézet által működtetett vizsgálati módszerek (PGAA, ICP-MS, Mössbauer- és fotoelektron-spektroszkópia) valamint az izotóp méréstechnika alkalmazásai.

Az intézet részt vesz a felsőoktatásban: több kutatója is rendszeres egyetemi előadásokat tart, az intézetben több PhD hallgató és diplomamunkás is dolgozik, ill. számos kutató tagja különböző egyetemek doktori iskolájának.

Az intézet *nemzetközi* kapcsolatai is széleskörűek. Ezt az is szemlélteti, hogy az intézeti közlemények több, mint felének van külföldi társszerzője. A BNC-nél működtetett PGAA mérőhely mérési kapacitásának kb. 1/3-a pályázható EU-s programokon keresztül külföldi vendégkutatók számára, akik a keretet általában kitöltik (évi 8 – 10 fő). A nukleáris biztonsági tevékenység terén az intézet képviselője tagja az ESARDA szervezetnek (European Safeguards Research and Development Association), fiatal intézeti munkatársak vendégkutatók az EU Joint Research Center hálózat intézeteiben. Az intézet a katalitikus kutatások terén intézményesített kapcsolatban van a berlini Fritz-Haber Intézettel, amely PhD képzésre az intézethez delegálta egyik diákját. Az elmúlt 8-10 év folyamán a közösen végzett kutatások terén (hol formális, hol informális) tartós együttműködések alakultak ki, a neutronfizikai területén a Lawrence Berkeley National Laboratory-val, sugárhatáskémia területén a Bolognai- egyetemmel, kétfémes katalizátorok vizsgálata terén a Poitiers-i egyetemmel. Ez utóbbi egyetem rendszeresen küldi diákjait is egyetemi képzés keretében az intézethez. Az intézet több osztálya vesz részt EU-s és Nemzetközi Atomenergia Ügynökségi (NAÜ) projektekben, melyek széles lehetőséget biztosítanak a további kooperációk kiépítésének. Az intézetben hat TÉT és négy kétoldalú MTA együttműködés folyik, a kutatók a csereutak lehetőségeit jól kihasználják.

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

Az intézet a kutatásra fordított összes közvetlen kiadásainak mintegy 25-30% -át fedezte a pályázatokon elnyert támogatásokból. A 2008-ban művelt jelentősebb *hazai pályázatok*:

- NKTH NAP VENEUS 5 2008-ban zárult. A projekt segítségével megújult a PGAA berendezés egy része (neutronvezető, detektor, mintakamra, nyalábzár).
- A tárgyévben elnyert, *szén-monoxid preferenciális oxidációja hidrogén jelenlétében* témájú (OTKA NF-73241) kutatások megkezdődtek. A munka folytatására a Comergen Rt. munkatársaival közösen fog sor kerülni.
- A folyó OTKA 60096 (2006–2010) pályázat keretében új, hidrofil tulajdonságú ojtott polipropilén kompozitokat állítottak elő.

#### Nemzetközi pályázatok:

- EU FP6 NMI3, *Muon Integrated Infrastructure Initiative (NMI3)*, 2008-ban 9 kutatót fogadtak.
- EU FP6 NEST ANCIENT CHARM EU STREP – 10 részt vevő EU-s intézet, *téma a 3D-s elemanalitika*,
- EU FP6 EURATOM EFNUDAT Integrated Infrastructure Initiative, 11 részt vevő EU-s intézet, *téma: Nukleáris adatok mérése*. 2008-ban két témában öt kutatót és két diákot fogadtak. A mérések értékelése folyamatban van.
- EU FP6 FUNMIG IP – 52 EU-intézményi résztvevős EURATOM-projekt. 2008-ban zárult. A projektben való intézeti részvétel lehetőséget adott a Bodai Agyagkő Formációból származó mintákon izotópmigrációs mérések végzésére. Az eredmények a hazai nagyaktivitású nukleáris hulladékok tárolóhelyének kiválasztásához is hozzájárulhatnak.
- EU FP7 ReCosy CP 32 EU-intézményi résztvevős EURATOM-projekt 2008-ban indult. A projekt a nagyaktivitású nukleáris hulladékok elhelyezésével kapcsolatos redox folyamatok vizsgálatát célozza. Az első évben a hazai perspektivikus közetben az ásványos összetevők  $Fe^{2+}/Fe^{3+}$  arányát határozták meg.
- COST D36 WG 003 *A két- és egyfémű nanorészecskék felületi funkcionálizálása nagy aktivitású és szelektivitású katalizátorok előállítására* témakörben palermói kutatókkal együttműködve  $TiO_2$ -vel és  $CeO_2$ -vel módosított  $SiO_2$  hordozós Au katalizátorok aktivitását vizsgálták propén teljes oxidációjában mint az illékony szerves anyagok teljes égetésének egy modell reakciójában.
- ERA Chemistry (nemzetközi OTKA 75009) francia és ír kutatókkal (University of Strasbourg, University of Limerick) együttműködésben kezdődtek meg a kutatások metán szén-dioxiddal végzett száraz reformálásában nagy aktivitású és stabilitású katalizátor kialakítására. 2008-ban  $Ni/MgAl_2O_4$  és  $NiAu/MgAl_2O_4$  katalizátorok aktivitását és mérgeződését vizsgálták. Megállapították, hogy az Au hozzáadása befolyásolja a lerakódó szén karakterét.
- NAÜ Technikai Kooperáció (Technical Cooperation) elnevezésű projekten 200 ezer USD támogatást nyertek víz- és szennyvízkezelés nagyenergiájú sugárzással témakörben, demonstrációs labor kiépítésére. Néhány alapvető műszert már beszerettek.

Összefoglalva megállapítható, hogy a felsorolt nagy projekteken való részvétel döntő mértékben hozzájárult ahhoz, hogy az intézet a kutatási feladatait megfelelő színvonalon teljesíteni tudta a beszámolási időszakban.



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

1. Sárkány A, Hargittai P, Geszti O: Thermal and radiolysis assisted formation of Au-Pd heteroaggregates. *Colloids and Surfaces A: Physicochem Eng Aspects* 322: 124–129 (2008)
2. Beck A, Horváth A, Stefler Gy, Katona R, Guczi L, Liotta L, et al: Formation and Structure of Au/TiO<sub>2</sub> and Au/CeO<sub>2</sub> Nanostructures in Mesoporous SBA-15. *Catal Today*;139:180–187 (2008)
3. Teschner D, Borsodi J(1/2), Wootsch A, Révay Zs, Hävecker A, Knop-Gericke A, et al. The Roles of Subsurface Carbon and Hydrogen in Palladium-Catalyzed Alkyne Hydrogenation. *Science*; 320(8): 86–89 (2008)
4. Révay Zs, Belgya T, Szentmiklósi L, Kis Z, Wootsch A, Borsodi J, et al: In Situ Determination of Hydrogen Inside a Catalytic Reactor Using Prompt  $\gamma$  Activation Analysis. *Anal Chem*;80: 6066–6071 (2008)
5. Teschner D, Révay Zs, Borsodi J, Hävecker M, Knop-Gericke A, Schlögl R, et al: Understanding Palladium Hydrogenation Catalysts: When the Nature of the Reactive Moleküle Controls the Nature of the Catalyst Active Phase. *Angewandte Chemie*; 47: 9274–9278 (2008)
6. Wojnárovits L, Takács E, Emmi SS: Nucleophilic and electrophilic radical attack on maleic and fumaric acids in aqueous solution. *Chem Phys Letters*; 460: 451–456 (2008)
7. Stefánka Zs, Katona R, Varga Zs: Laser ablation assisted ICP-MS as a tool for rapid categorization of seized uranium oxide materials based on isotopic composition determination. *J of Anal Atomic Spectrometry*; 23: 1030–1033 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Izotópkutató Intézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	92	Ebből kutató <sup>2</sup> :	47
PhD, kandidátus:	20	MTA doktora:	8
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
			17
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			63
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			62
Ebből impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	52
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	10
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	114,02	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	350
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			350
Magyarul könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	6
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	3	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	ebből külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	41	posztterek száma <sup>10</sup> :	20
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	4
		PhD-t:	7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			130
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			294,9 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	5	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	319,6 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			10
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	43,4 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,5 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			10
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	255,7 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

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

Telefon: 438-1111; Fax: 438-1143

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

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

A kutatóközpont alapvető közfeladata, hogy a kémia és a vele rokon tudományágak (elsősorban az élettudományok, az anyagtudományok, a környezettudományok és a nanotudományok) fontos területein olyan nemzetközi színvonalú tudományos kutatásokat folytasson, amelyek több kutatócsoport összehangolt tevékenységét és különféle, korszerű nagyműszeres módszerek koordinált alkalmazását igénylik.

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

A központ tevékenységében lényeges szerepük van a hazai, ill. az európai iparvállalatokat segítő, a versenyképesség fokozását, korszerű termékek és eljárások kidolgozását szolgáló kutatási programoknak. Ebből a szempontból kiemelkedő jelentősége volt a „Kémia az életminőség javításáért, Kémiai Kooperációs Kutatási Központ tevékenységének megerősítése, a technológiai folyamatok elősegítése” c. (Új Magyarország Fejlesztési Terv, Közép-Magyarországi Operatív Program) pályázat feladatai 2008. évi teljesítésének. Az említett projekten kívül összesen 27 NKTH, ill. NKFP-által támogatott témában is részt vettek a központ kutatói 2008-ban. Ezeknek a programoknak az eredményei, reményeink szerint hozzájárulnak az ország gazdasági stabilizációjához, valamint az akadémiai-egyetemi kutatóhelyeknek a vállalati kutatási-fejlesztési programokba való bevonásához. A kitűzött célok elérését jelentős mértékben segítette az EU kutatási programokban való aktív részvétel is.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2008. évi tudományos kutatásait a funkcionális anyagok kémiai kutatása, előállításuknak, szerkezetüknek és tulajdonságaiknak a vizsgálata foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

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

A kutatások említett irányainak tematikai koncepcióját és az egyes témákban eddig elért eredményeket a Központ Nemzetközi Tudományos Tanácsadó Testülete 2008. május 20–22-én megtartott ülésén megtárgyalta, és nemzetközi színvonalúnak minősítette.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	377	Ebből kutató <sup>2</sup> :	239
PhD, kandidátus:	93	MTA doktora:	39
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
			91
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			259
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			255
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	1	idegen nyelven:	164
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	7	idegen nyelven:	29
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	384,238	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	4158
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			3206
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	3
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	24
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	16	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	2	<i>ebből</i> külföldön:	1
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	102	posztterek száma <sup>10</sup> :	98
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	32	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	43
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			47
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	13	Diplomamunkát:	23
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	81
			3203
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			1904,5 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	20	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	956,2 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			14,5 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			50
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	104,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			27
NKFP:	27	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	414 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			12
EU-forrásból:	11	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	125 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,4 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			429
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	414,8 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

**Kémiai Kutatóközpont**  
**ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET**  
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67. Levélcím: 1525 Budapest, Pf. 17.  
Telefon: 438-1130, Fax: 438-1147  
e-mail: szepvol@chemres.hu, honlap: www.chemres.hu/aki

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

Az intézetben 2008-ban is olyan komplex kutatási témákat műveltek, amelyekben az anyagtudományi és anyagtechnológiai, valamint a környezetkémiai vonatkozások együtt, egymást kiegészítve jelentek meg.

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

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

### *Anyagkémiai kutatások*

#### Nanorétegek előállítás és vizsgálata

Polietilén-tereftalát felületét kezelték nitrogénionokkal, plazmaimmerziós ionimplantációs módszerrel. Megállapították, hogy a kezelés hatására a minta felülete jelentősen átalakult: a nitrogén beépülését, az O/C arány csökkenését és a C 1s csúcs tömbi plazmonvesztési energiájának növekedését észlelték. A felületi érdesség és keménység megnőtt, a rugalmas modulus pedig csökkent. Olyan kezelési paraméter-együttest találtak, amelynél a kopásállóság kb. négyszeresére nőtt.

Poli-tetrafluor-etilén felületét gyorsatomsugaras módszerrel módosítva a felületi fluortartalom nagymértékben lecsökkent. Raman vizsgálatokkal bizonyították, hogy amorf szénszerű szerkezet alakult ki. Csökkent a nedvesedési peremszög, megnőtt a felületi energia és megnőtt a felület kopásállósága.

Továbbfejlesztették a röntgenfotoelektron-spektrumok kvantitatív kiértékelésére szolgáló XPS MultiQuant programot, így lehetővé vált a gyakorlatban előforduló durva felületű anyagokon (mikrokristályos, szemcsés anyagok, rovátkolt felületek) előforduló rétegek vastagságának pontosabb kiértékelése. Strukturált szilícium és alumínium mintákon tesztelték a modell és a program alkalmazhatóságát.

*Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 12 MFt, ebből pályázati forrás: 4 MFt.*

#### Egyszerű és kompozit kerámia-bevonatok kialakítása

Egy-, illetve kétkomponensű oxidokból ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3+\text{TiO}_2$ , mullit) álló, valamint oxidmátrixba ágyazott SiC és  $\text{Si}_3\text{N}_4$  szemcsékből álló nanokompozit bevonatokat hoztak létre plazmaszórással fémes és nemfémes felületeken. Vizsgálták a bevonatok kémiai és fázisösszetételét, szerkezetét, adhézióját és egyéb fizikai tulajdonságait. További, a kompozitréteg mátrixába beágyazni kívánt, speciális adalék anyagokat így félvezető tulajdonságú SiC szemcséket, és magas Curie ponttal rendelkező ferriteket állítottak elő RF termikus plazmareaktorban. A kutatások anyagi fedezetét döntő részben NKTH-pályázat biztosította.

*Kutatói ráfordítás: 10 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 MFt, ebből pályázati forrás: 35 MFt.*

#### Fém-poligalakturonát komplexek szintézise és vizsgálata

A fémhiányos állapot kezelésére alkalmas, poligalakturonsav hordozóhoz kötött esszenciális fémek komplexeinek szerkezetét, az egyes mikrokozonyezetek előfordulásának alakulását Mössbauer spektroszkópiával tanulmányozták. E vizsgálatok is alátámasztották a vashiányos anémia kezelésére kifejlesztett Ferrocomp tableta hatásosságát, melyet a Kémiai Kutatóközpont licence alapján az In Vitro Kft gyárt és forgalmaz.

*Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 3 MFt, ebből pályázati forrás: -.*

#### Funkcionális szemcsés anyagok előállítása, formálása és jellemzése

A BioPowders elnevezésű nemzetközi projekt keretében vizsgálták, hogy a katalizátorhordozóként előállított nanoszerkezetű kitozán mikrogömbök milyen mértékben alkalmazhatóak enzim rögzítésére, és miképpen befolyásolják az előállított hordozós biokatalizátor aktivitását. Bizonyították, hogy az így kifejlesztett nanoszerkezetű biokatalizátor hordozók biotechnológiai célra alkalmasak.

Ipari szempontból fontos eredményeket értek el az elektronikai alkatrészek köpenyében alkalmazható funkcionális szemcsés anyagok előállításában, illetve tulajdonságaik javításában: megfelelő morfológiájú és mágneses tulajdonságú ferritporokat állítottak elő. Fluidizációs granulálással javították a kerámiai alapanyagok reológiai tulajdonságait. Vizsgálták a talajszennyezők transzportfolyamatait, és elemezték a talajok tulajdonságait alapvetően meghatározó részecskeméret eloszlást. A lézeres szemcseméret analízis szabványosításához elővizsgálatokat végeztek. Inert töltetes gejzír szárítóban fehérje típusú hatóanyaggal kompozitokat készítettek kitozán hordozó alkalmazásával.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 9,6 MFt, ebből pályázati forrás: 5,3 MFt.*

#### Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók és alkalmazásuk

Az amfifil kotérhálók és hidrogélekkel kapcsolatos kutatásaik egyik vonulata a gyógyszerhatóanyag felvételére és leadására, valamint élesztő sejtek immobilizálására alkalmas gélekre irányult. Különböző fémionok megkötésének tanulmányozása céljából vizes rendszerekből állítottak elő komplexképző poli(N-vinil-imidazol)t tartalmazó amfifil kotérhálókat. AFM vizsgálatokkal felderítették ezek különleges nanofázisú szerkezetét, valamint meghatározták fémion felvételüket.

Poli(metakrilsav)-l-poliizobutilén kotérhálók duzzadását vizsgálták  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  és  $\text{La}^{3+}$  tartalmú vizes oldatokban. Azt találták, hogy szemben a hagyományos homopolimer polielektrolit gélekkel, ezekben a rendszerekben a gél nem esik össze. Etoxietyl-akrilát és etoxietyl-metakrilát monomerekkel új szintézismódszert dolgoztak ki amfifil kotérhálók előállítására. Elvégezték a kotérhálók termikus analízisét, valamint IR spektroszkópiával tanulmányozták azok hidrolízisét, termolízisét és duzzadási tulajdonságait.

Poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliizobutilén amfifil kotérhálókval sikeresen állítottak elő nanoméretű fémezüstöt tartalmazó nanohibrid anyagokat. UV-VIS spektrofotometriás vizsgálatokkal egyértelműen igazolták az ezüst nanorészecskék képződését.

Kísérleteket tettek újfajta, hőre érzékeny, „intelligens” amfifil kotérhálók szintézisére poli(N,N-dietil-akrilamid) mint hidrofil és poli(dimetil-sziloxán), illetve poliizobutilén, mint hidrofób komponensek felhasználásával. Az ilyen anyagok széles körben alkalmazhatók a gyógyásztól, a biotechnológián át a szenzorokig bezárólag.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 MFt, ebből pályázati forrás: 4 MFt.*

#### Jól definiált szerkezetű polimerek szintézise gyökös polimerizációval és anyagszerkezeti vizsgálatuk

A kilencvenes évek közepén kidolgozott kvázielő gyökös polimerizációs eljárásokkal olyan komplex szerkezetű polimerek gazdaságos és környezetileg előnyös előállítására nyílt lehetőség, amelyek felülmúlják számos eddig használt polimer fizikai és kémiai tulajdonságait. Különböző tulajdonságú monomerek kvázielő gyökös polimerizációját kísérelték meg egy környezetbarátnak tartott, halogénmentes oldószerben. Eredményeik nagyon biztatóak; az adott módszerrel csökkenthető a polimerek előállításakor okozott környezetterhelést.

Új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására. Ennek alapján kereskedelmi forgalomban kapható monomerek (sztirol és akrilátok) felhasználásával is, egy lépésben előállíthatók nagyszámú funkciós csoporttal rendelkező hiperelágazásos polimerek. Az itt szerzett tudást fogászati alkalmazásokban és ipari együttműködésekben is megpróbálják kamatoztatni: egy külföldi vegyipari céggel több éve folytatnak kutatási együttműködést az adott témakörben.

Jól definiált szerkezetű poli(etilén-oxid) és poliizobutilén blokkokból álló új típusú ABA triblokk-kopolimert szintetizáltak. Ez biokompatibilitása révén nagy jelentőségű lehet például gyógyászati felhasználásokban.

Az előállított polimereket minden esetben modern analitikai módszerekkel, például lézer fényszóródás detektorral felszerelt gélpermeációs kromatográfiával és NMR spektroszkópiával vizsgálták.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 MFt, ebből pályázati forrás: 3 MFt.*

#### Karbokationos polimerizációs kutatások

Kvázielő karbokationos polimerizációs kutatásaik a polimerizáció mechanizmusának, a kapott polimerek módosítási reakcióinak, szerkezetének és tulajdonságainak a vizsgálatára irányultak. Vizsgálták egyes különleges adalékanyagok hatását az izobutilén polimerizációjára. Megállapították, hogy e vegyületek jelenlétében, karbokationos körülmények között, a poliizobutilén láncokon nagymértékben alakulnak ki láncvégi kettőskötések.

A láncvégi kettőskötést tartalmazó poliizobutiléneket sikeresen funkcionalizálták tovább, „tiol-én” reakcióval. A módszer számos funkciós csoport bevitelét teszi lehetővé egy addíciós lépésben.

A környezetileg előnyös, „zöld” polimer kémiát megcélzó kutatásaikat is tovább folytatták. A reakciók kivitelezésekor szobahőfokon, klórozott oldószerek használata nélkül állítottak elő különböző szerkezetű polisztirolokat, és meghatározták az adalékanyagok szükséges minimális koncentrációját is.

Egy korábban nemkívánatos mellékreakció kihasználásával sikeresen állítottak elő hiperelágazásos polisztirolt. Felderítették és igazolták, hogy az elágazó szerkezetet a láncvégi karbokation és a láncmenti fenil csoportok között lejátszódó intermolekuláris Friedel-Crafts alkilezés eredményezi. Optimalizálták a reakciókörülményeket, és felderítették, hogy miként szabályozhatók a hiperelágazásos polimerek szerkezete és tulajdonságai.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 MFt, ebből pályázati forrás: -.*

#### Poliolefinok degradációja és stabilizálása

Tanulmányozták a különböző katalizátorokkal gyártott polietilén és polipropilén degradációját és a stabilizálást befolyásoló tényezőket, feldolgozási és alkalmazási körülmények között. Vizsgálták, hogy a katalizátor típusa és a gyártási paraméterek miként befolyásolják a polietilén és a polipropilén jellemzőit. Összefüggést állapítottak meg a polimer por jellemzői és a feldolgozás során végbemenő kémiai folyamatok között. Megállapították, hogy a polietilén feldolgozása során lejátszódó reakciókat elsősorban a foszfortartalmú antioxidánsok típusa határozza meg. Modellkísérletek segítségével feltárták az egyes foszfortartalmú antioxidánsok hatékonysága közötti különbségek okát. Megállapították, hogy a hatékonyságot a stabilizátor molekula reakcióképessége és saját termikus stabilitása egyaránt befolyásolja. Elemezték a savmegkötő hatású adalékok szerepét a stabilizátorok hatékonyságában és fogyásában a polietilén feldolgozása során. Megállapították, hogy a teljes adalékcsomag összetételével változik a hatás. A TVK-val, mint poliolefin gyártóval együttműködésben vizsgálták polietilén csövekben az antioxidánsok hidrolitikus stabilitását. A kutatás eredményei közvetlenül hasznosíthatók a különböző poliolefinok adalékrendszerének kidolgozásában, javítva ezzel a termékek versenyképességét.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 12 MFt, ebből pályázati forrás: -.*

#### Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Különböző polimerek és társított rendszereik szerkezet-tulajdonság összefüggéseit és a terhelés hatására végbemenő deformációs folyamatokat tanulmányozták. Ennek keretében vizsgálták a különböző szemcseméretű töltőanyagot tartalmazó PP/faliszt kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusát. Megállapították, hogy a kompozitok merevsége növekszik a töltőanyag-tartalommal, a kapcsolóanyagként alkalmazott funkcionalizált polimer típusa és mennyisége azonban nem befolyásolja különösebben a modulus értékeket. Az egyéb mechanikai jellemzők azonban nagymértékben függenek az alkalmazott kapcsolóanyag (maleinsav-anhidriddel módosított polipropilén) típusától és mennyiségétől. A nagyobb molekulatömegű és kisebb funkcionalizálású kapcsolóanyag használata előnyösebb a szilárdság és a törési ellenállás szempontjából egyaránt.



További vizsgálatokat végeztek és jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Reológiai jellemzők vizsgálatával tanulmányozták a kompozitok szerkezetét. Megállapították, hogy a rétegszilikát nanokompozitokban az exfoliáció hatására kialakuló hálószerkezet a relaxációs idő növekedését okozza, amely igen érzékenyen nyomon követhető reológiai vizsgálatokkal. Modellszámításokkal sikerült olyan paramétereket meghatározniuk, amelyek alkalmasak a szerkezetváltozás kvantitatív jellemzésére. A természetes polimerek kutatása során a cellulóz-acetát és más hasonló szerkezetű természetes alapú polimerek DMTA spektrumán meghatározták a jelentkező  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ -átmenetekhez rendelhető csoportokat, illetve molekularészeket.  
*Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 19 MFt, ebből pályázati forrás: 5,1 MFt.*

### *Környezeti kémiai kutatások*

#### Műanyagok újrahasznosítását megalapozó kutatások

Y típusú zeolitok alkalmazhatóságát vizsgálták poliamid 6,6 és akrilnitril-butadién-sztirol kopolimer pirolízises újrahasznosítására. Megállapították, hogy e polimerek környezetvédelmi szempontból aggályos, nitrogéntartalmú vegyületekre vezető hőbomlását a zeolitok nem befolyásolják számottevő mértékben. Ugyanakkor a zeolitok hatékonyan alakították át a hőbomlás termékeit. Azt tapasztalták, hogy a protonos Y zeolitok a pirolízis termék nitrogénmentesítésére használhatók, a nátriumtartalmú zeolitok pedig a pirolizátumot szennyező halogéntartalmú vegyületek eltávolítására alkalmasak. Utóbbiak aktivitása függ a halogén-szén kötés típusától.

Továbbfolytatták a PVC célzott degradatív átalakításának tanulmányozását újabb, környezetileg előnyös újrafelhasználási lehetőségek kutatása céljából. A hőstabilizátorként használt cink-sztearát adalékanyag hatásának vizsgálata során megállapították, hogy ez nagymértékben gyorsítja a lebomlást, és egyidejűleg poliének kialakulását a polimer láncban. Ez lehetővé teszi a PVC hulladékok olyan átalakítását, amelynél a reaktív kettőskötéseket tartalmazó PVC másodlagos, újrahasznosított termékek kiindulási anyaga lehet.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 MFt, ebből pályázati forrás: 2,4 MFt.*

#### Biomassza anyagok hasznosítását megalapozó kutatások

Új környezetkímélő eljárással (lakkáz enzimmel és violursav adalékkal) fehérített rostpépeket tanulmányoztak. Módszert dolgoztak ki a rostpépek maradék lignintartalmának meghatározására, "in-situ" pirolízis-gázkromatográfia-tömegspektrometria alkalmazásával. Kimutatták, hogy a lignin monomerek mennyiségi arányai jelentősen megváltoznak a rostpép és a maradék lignin minták pirogramjaiban. Megállapították, hogy az enzimes biofehérítés során hasonló változások történnek a lignin funkciós csoportjaiban, mint a cellulózgyártás Kraft eljárása során.

Energetikai célokra alkalmazható biomasszák (szalmák, kukoricaszár, cirok, rizshéj, abesszin mustár) hőbomlási tulajdonságait vizsgálták. Mint ismeretes, a hőbomlás az égés egyik fő reakciója, amelllett számos ipari folyamatban is fontos szerepet játszik. Egy olyan reakciókinetikai modellt alkalmaztak, amely viszonylag kevés ismeretlen paraméterrel megbízhatóan írja le e bonyolult anyagok viselkedését. Annak ellenére, hogy a vizsgált mintasor főbb

biomassza alkotóiban, valamint az ásványi-anyag tartalmában jelentős különbségek voltak, sok közös vonást találtak a kinetikai viselkedésükben.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 23 MFt, ebből pályázati forrás: 2,6 MFt.*

#### Légkörkémiiai kutatások

Meghatározták az acetyl-fluorid OH-gyökkel végbemenő gázfázisú elemi reakciójának sebességi együtthatóját és fotobomlási kvantumhatásfokát. Megállapították, hogy a fluor-szubsztitúció erős negatív induktív hatást gyakorol a reaktivásra, megadták a hatás mértékére jellemző csoportadditivitási együttható értékét. A fotobomlás kvantumhatásfoka lényegesen kisebb egynél, ami a fotofizikai kioltási folyamatok jelentőségét mutatja. Az acetyl-fluorid a HFC-152a ( $\text{CH}_3\text{CHF}_2$ ) freonhelyettesítő anyag légköri lebomlása során keletkezik. Eredményeik alapján arra a következtetésre jutottak, hogy az acetyl-fluorid légköri élettartama viszonylag rövid és így üvegházhatása nem jelentős.

Élettartammérésekkel meghatározták, hogy légköri körülmények között a szingulett gerjesztett acetont milyen sebességgel oltja ki az oxigén. A folyamat sebességi állandója viszonylag kicsi, ami arra utal, hogy a reakció spin-tiltott, hőmérsékletfüggése pedig azt jelzi, hogy a folyamatnak negatív aktiválási állandója van.

Egyszerűen kivitelezhető eljárást dolgoztak ki a 3,3',5,5'-tetra-(trifluorometil)-benzofenon előállítására. Ennek a molekulának rendkívül érdekes fotokémiai-kinetikai tulajdonságai vannak, amelyek miatt a környezeti fotokémiában is valószínűleg alkalmazható.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 38 MFt, ebből pályázati forrás: 7MFt.*

#### Környezeti elektrokémia

A környezetben felhalmozódó platina koncentrációjának mérésére szolgáló nagyérzékenységű elektroanalitikai módszer fejlesztettek ki. Megállapították, hogy aranyra híg oldatokból elektromos polarizáció nélkül is leválik kis mennyiségű platina az egyensúlyi fémleválás potenciáljánál pozitívabb potenciálon.

Az anionok adszorpciójának, az elektrokémiai kettősréteg szerkezetének jellemzése végett elektrokémiai alpméréseket végeztek a platinacsoport egykristályain, biner elektrolit-oldatokban. Kimutatták, hogy az impedanciaspektrumokkal jellemezhető az oldat anionjainak mozgási sebessége a külső és belső Helmholtz sík között.

Korábban eljárást dolgoztak ki femtoamper nagyságrendű áramok gyors mérésére. A mérőkészüléket továbbfejlesztették és az alkalmassá vált a különösen nagy érzékenységű, ultramikro-elektrodokon végzett mérésekre is.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 40 MFt, ebből pályázati forrás: 4,5 MFt*

#### Olajszennyezések monitorozása geoelektromos módszerrel, meglévő olajszennyezések kárenyhítése

Előkísérleteket folytattak lokális olajszennyezések felkutatására a talajjellenállás feltérképezésén alapuló geoelektromos módszerrel. Ezzel párhuzamosan kidolgozták a meglévő olajszennyezések helyszíni kárenyhítését szolgáló technológiát a majdani hasznosító

MOL NyRt. megbízásából. Ennek keretében részletes olajvizsgálatokat (GC/MS, HPLC, UV/VIS) végeztek a hazánkban előforduló olajtípusok körében, részben a technológia kidolgozása, részben az ennek során felmerülő analitikai feladatok megoldásának optimalizálása érdekében. Vizsgálták az olajtípusok talajról történő laboratóriumi extrakciójának lehetőségeit, és előkészítették a talajanalitikai vizsgálatokat.

*Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 12 MFt, ebből pályázati forrás: -.*

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

Az AKI kutatói 2008-ban is számos hazai kutatóhellyel dolgoztak együtt sokféle kutatási témában. Különösen intenzívek voltak kutatási együttműködések az MTA intézeteivel, így a Kémiai Kutatóközpont másik három intézetével, valamint nanotechnológiai témában a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetrel.

Az intézet munkatársai a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyész- és Biomérnöki Karán és az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán tartottak graduális és posztgraduális előadásokat, vezettek szemináriumokat és laborgyakorlatokat. Az oktatáson kívül sokrétű kutatási kapcsolatot is ápolnak velük: a BME-vel cellulóz alapú bioetanol gyártás, az ELTE-vel polimertartalmú felületi nanostruktúrák szerkezetvizsgálata, PP és PA nanokompozitok szerkezet/tulajdonság összefüggéseinek megállapítása területén. A Semmelweis Egyetemen humánbiológiai témákban, a Pécsi Egyetem Általános Orvostudományi Karával orvosi célú PU fejlesztésében működtek együtt.

Az intézet a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtet, és funkcionális nanorészecskék témában folytat kilenc publikációban megmutatkozó gyümölcsöző együttműködést. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály egy szakmai egységet alkot a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével. Ugyancsak e két egyetem kutatóival közösen tanulmányozzák a biomassza hasznosítás kémiai alapfolyamatait.

Külföldi partnerekkel formális kétoldalú kutatási együttműködések keretében az alábbi témákban dolgoztak együtt:

Plazmakémiai folyamatokat modelleztek, és termodinamikai számítások készültek a Si/C/N/O/B/H anyagrendszerre, Magyar - orosz MTA kétoldalú megállapodás keretében a moszkvai Általános és Szeretlen Kémiai Intézetrel közösen.

Tetraammincink(II)-dipermanganátot szintetizáltak, és meghatározták szerkezetét XRD és vibrációs spektroszkópiás módszerrel, MTA-INSA Akadémiai Együttműködési szerződés keretében az indiai Jodhpur Egyetemen.

Energetikai célokra alkalmazható biomassza anyagok hőbomlási tulajdonságait határozták meg egy Magyar-kínai TéT-projekt keretében a Dongying városban működő China University of Petroleummal együttműködve.

Légkörkémiail témában ARCUS / PhyCAFoR egyezmény keretében a Lille-i Egyetemmel közös PhD témát vezettek. Kinetikai és fotokémiai kísérletekkel meghatározták a 2-butanon fotobomlási kvantumhatásfokának hőmérséklet- és nyomásfüggését, Magyar–francia TÉT együttműködésben az orléans-i Égési és Reaktív Rendszerek Laboratóriummal.

A klímaváltozás és a légkör kémiája kapcsolatával foglalkozó Magyar–lengyel TÉT együttműködésben javaslatot tettek az acetone légköri fotobomlásának molekuláris mechanizmusára. Elemi reakciók kinetikáját és mechanizmusát vizsgálva meghatározták a brómatom és néhány szerves molekula elemi reakciójának sebességi együtthatóját és potenciálfelületét. A munkát Magyar–lengyel Akadémiai Együttműködés keretében a Wrocław-i Egyetemmel közösen végezték.

Több különböző rendszeren mutatták meg, hogy az elektrokémiai kettősréteg elektromos szempontból nem ideálisan kapacitív. A jelenség okait MTA – DFG együttműködés keretében a német Ulmi Egyetemmel vizsgálták.

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

##### *Hazai pályázatok*

Az intézet kutatói 2008-ban a következő OTKA illetve OTKA-NKTH pályázatokon dolgoztak, és az alábbi figyelemre méltó eredményeket érték el:

- Biomassza anyagok erőművekben történő jobb hasznosítását elősegítő alapismereteket nyertek (K-72710).
- Nitrogén- és halogéntartalmú polimerek pirolízisének zeolit katalizátorokon módosított termékeit elemezték, és értelmezték a bekövetkezett kémiai átalakulásokat (K-68752).
- Meghatározták a CH<sub>3</sub>CO- és CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>2</sub>-gyökök oxigénmolekulával végbemenő elemi reakciójának kinetikai paramétereit (K-68486).
- Poli-tejsav alapú minták felületi összetételét és szerkezetét jellemezték XPS módszerrel (K-68120).
- Polipropilén (PP) és keményítő alapú nanokompozitokban vizsgálták a határfelületi kölcsönhatások szerepét a kompozitok szerkezetének alakulásában. Megállapították, hogy a legkedvezőbb tulajdonságú kompozit előállításához a töltőanyag/glicerin/víz arányt pontosan kell meghatározni (K-67936).
- Kimutatták, hogy elektrokémiai úton előállítható platina monoréteggel borított aranyfelület. Jellemezték az adszorpció kinetikáját olyan esetben, amikor egy biner elektrolit mindkét ionja adszorbeálódik (K-67874).
- Műszaki műanyagok, mint polietilén-tereftalát és poli-tetrafluor-etilén felületét módosították plazmaimerziós ionimplantációs és gyorsatomsugaras módszerrel, és meghatározták a felületi kémiai, nanomechanikai és tribológiai változásokat (K-67741).
- Környezetkímélő eljárással fehérített rostpépek maradék lignintartalmát, valamint a lignin összetételében biofehérítéskor bekövetkező változásokat határozták meg (K61504).
- A specifikus adszorpció során az adszorbeált molekulák között lejátszódó töltésátlépési folyamatokról tettek megállapításokat (T-45888).
- Hiperelágazásos polimerek szerkezete és a kiindulási lineáris polimer karok molekulatömege közötti összefüggést állapították meg, valamint új módszert dolgoztak ki ilyen polimerek előállítására (T-48409).

- PP/falaszt kompozitok vizsgálata alapján megállapítottuk, hogy a kompozitok merevsége növekszik a töltőanyag tartalommal. A kapcsolóanyagként alkalmazott funkcionizált polimer típusa és mennyisége azonban nem befolyásolja különösebben a merevséget (F-68579).
- Szabályosan váltakozó szerkezetű amfifil polimer kotérhálók és multifunkciós inimerék alkalmazásával új hiperelágazásos és csillag polimerek szintézisét dolgozták ki (F-61299).
- Az intézet kutatói egyéb hazai kutatási pályázatokban a következő eredményeket érték el 2008-ban:
- Felszerelték és hidegüzemben kipróbálták a festőüzemekben levegőtisztításra használt aktív szén adszorbensek helyszíni regenerálására kifejlesztett technológia mérő és folyamatszabályozó rendszerét (GVOP-3.1.1./2004-05-0153/3.0).
- Nanoméretű, oxid- és nemoxid típusú kerámia-bevonatok kialakítását vizsgálták atmoszférikus plazmaszórással. Előállítottak szilícium-karbid nanoszálakat és nanocsöveket (OMFB-00252/2007).
- Vizsgálták különböző fémek alkalmazhatóságát ipari hulladékok feldolgozhatóságára (JÁP\_TSZ\_P0400808).
- Előre meghatározott tulajdonságú poli(etilén-imin) állítottak elő (DermaVi\_HIKC05 Asbóth program).
- Megállapították, hogy az antioxidáns- és elempótlás nélkülözhetetlen az egészséges élethez, de a koncentrációtartomány tág, és függ az egyed genetikai adottságaitól. A bioaktív vegyületek hosszas, kontrollálatlan fogyasztása azonban kontraindikált (ETT 012/2006).
- Meghatározták a prosztatatarakos és jóindulatú prosztatata-megnagyobbodásban szenvedő férfiakban a szérum és a plazma immun- és redox-paramétereit, Zn-protoporfirin/protoporfirin koncentrációit, dimedonnal reakcióba lépő kötött HCHO-koncentrációját, össz-scavenger-kapacitását, fémiontartalmát és szelénkoncentrációját (ETT 354/2006).

#### *Nemzetközi pályázatok*

Az intézet kutatói az alábbi EU-pályázatok kidolgozásában vettek részt 2008-ban:

- Alifás ketonok és sav-haloidok légköri lebomlására állapítottak meg kinetikai és fotokémiai paramétereiket (GOCE-CT-2004-505390-SCOUTO3).
- Enzimek rögzítésére alkalmas, makro-, mikro- és nanoszemcsés kitozán hordozó részecskék előállítására dolgoztak ki módszereket (MRTN-CT-2004-512247).
- Egyéb nemzetközi vagy külföldi forrásból 2008-ban művelt témák:
- Új típusú multifunkciós polimerek kutatásán dolgoztak a DuPont (USA) Research Award támogatásával.
- Mágneses nanorészecskéket tartalmazó szénhagymákat készítettek RF plazmában, a Varsói Egyetem Kémia Tanszék munkatársaival együttműködésben.
- Különleges nanoporokat állítottak elő RF termikus plazmában, a BASF céggel (Németország) együttműködve.
- Széles nemzetközi együttműködésben a PP és PA nanokompozitok szerkezet/tulajdonság összefüggéseiről tettek megállapításokat, a Twente Egyetem (Hollandia), az Inha Egyetem (Korea) és a Szlovák Tudományos Akadémia Polimer Intézete kutatóival közösen. Polimerek stabilizálásán a francia Clariant Huningue S.A. céggel dolgoztak együtt.
- A Volkswagen Alap támogatásával fotofizikai témán dolgoztak a göttingeni Max-Planck-Intézet kutatóival. Megállapításokat tettek a dimetilamino-adenin fotofizikai sajátságairól.

- Biomassza anyagok hasznosítását, faszén széndioxiddal történő elgázosítását tanulmányozták a trondheimi Norvég Tudományos és Technológiai Egyetemmel közösen.
- Dohány hőbomlását vizsgálták a British American Tobacco R&D Centre kutatóival abból a célból, hogy az eredmények hozzájáruljanak a dohányzás ártalmainak csökkentéséhez.
- Új környezetkímélő eljárással (lakkáz enzimmel és violursav adalékkal) fehéřített rostpépeket tanulmányoztak portugál együttmőködés keretében a Beira Interior Egyetemmel.

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

1. Czégény Zs, Blazsó M: Effect of phosphorous flame retardants on the thermal decomposition of vinyl polymers and copolymers, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 81, 218–224 (2008)
2. Demeter A, Zachariasse K A: Triplet state dipole moments of aminobenzonitriles, *Journal of Physical Chemistry A*, 112(7), 1359–1362 (2008)
3. Feczkó T, Muskotál A, Gál L, Szépvolgyi J, Sebestyén A, Vonderviszt F: Synthesis of Ni-Zn ferrite nanoparticles in radiofrequency thermal plasma reactor and their use for purification of histidine-tagged proteins, *Journal of Nanoparticle Research*, 10, 227–232 (2008)
4. Iván B, Erdődi G, Hellner Á., Groh P W, Kali G, Kasza Gy, Szanka I, Szesztay M, Soltész A: New ways for the synthesis of hyperbranched polymers, *Macromol. Rapid. Comm.*, 29, F16-18 (2008)
5. Jewrajka S K, Erdődi G, Kennedy J P, Ely D, Dunphy G, Boehme S, Popescu F: Novel biostable and biocompatible amphiphilic membranes, *J. Biomed. Mater. Res, Part A*, 87A, 69–77 (2008)
6. Keresztúri K, Szabó A, Tóth A, Marosi G, Szépvolgyi J: Surface modification of poly-(tetra-fluoro-ethylene) by saddle field atom beam source. *Surf. Coat. Technol.* 202, 6034–6037 (2008)
7. Kriston I, Földes E, Staniek P, Pukánszky B: Dominating reactions in the degradation of HDPE during long term ageing in water, *Polymer Degradation and Stability*, 93, 1715–1722 (2008)
8. Pajkossy T, Kolb D M: Anion-adsorption related frequency-dependent double layer capacitance of the platinum group metals in the double layer region, *Electrochimica Acta* 53, 7403–7409 (2008)
9. Pukánszky B Jr, Bagdi K, Tóvolgyi Zs, Varga J, Botz L, Hudak S, Dóczy T, Pukánszky B: Nanophase separation in segmented polyurethane elastomers: Effect of specific interactions on structure and properties, *European Polymer Journal*, 44, 2431–2438 (2008)
10. Szépvolgyi J, Mohai I, Károly Z, Gál L: Synthesis of nanosized ceramic powders in a radiofrequency thermal plasma reactor, *Journal of European Ceramic Society*, 28, 895–899 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

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

Átlagléttszám <sup>1</sup> :	100	Ebből kutató <sup>2</sup> :	57
PhD, kandidátus:	20	MTA doktora:	12
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			94
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			91
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	50
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	9	idegen nyelven:	10
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	86,448	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	1190
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			986
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	3
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	4	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	34	posztterek száma <sup>10</sup> :	40
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	12	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	16
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			16
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	9	Diplomamunkát:	17
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	23
			1907
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			564,7 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	5	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	306,2 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			1,7 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			16
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	28,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			9
NKFP:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	129,3 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3,3 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			327
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	248,5 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

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

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

A kutatóhely alapvető közfeladata volt a 2008. évben, hogy nemzetközi színvonalú tudományos kutatásokat folytasson az élő szervezetek kémiai folyamatainak, az ezekben szerepet játszó molekuláknak a megismerése, a folyamatok kedvező irányú befolyásolása, illetve a molekulák tervezése és szintézise területén.

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

Az intézet fontos kötelezettségei közé tartozott a 2008. évi hazai és európai kutatási pályázatok időszerű feladatainak teljesítése.

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

#### *Heterociklusos kémiai kutatások*

Újabb, palládium-katalizált keresztkapcsolások végrehajtásával fenotiazinnal szubsztituált dién-származékokat szintetizáltak, amelyeknek a multidrog-rezisztenciára gyakorolt hatását kooperációban kutatták. A rezisztenciagátlás vizsgálata az életminőség javítása szempontjából napjaink egyik kiemelt területe.

Ikerionos vegyületek tanulmányozásának során, új típusú váz-átrendeződéseket figyeltek meg, amely átalakulások megismerése lényeges szerepet játszott a vegyülettípusok reakciókészségének értelmezésében.

Több olyan gyűrűzárást dolgoztak ki, melyek kondenzált pirazolokat és triazolokat eredményeztek. Az új gyűrűrendszerek szintézise alapvető jelentőségű a gyógyszerkémiaiban, mivel új gyógyhatású származékok felismerésének fontos forrását jelenti.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 MFt, ebből pályázati forrás: -.*

#### *Organokatalízis kutatások*

A korábbi években egy olyan fázisjelölő módszert fejlesztettek ki, amely kiküszöböli az eddigi módszerek gyengéit, ugyanakkor azoknál lényegesen olcsóbb. Nem a korábbi gyakorlatnak megfelelő, nagyméretű fázisjelölő csoportokat alkalmazták, hanem a lehető



legkisebbeket: a trifluormetil-, illetve a tercier-butil-csoportot. Ennek kidolgozását az alapvető megfigyelés tette lehetővé, hogy a minimálisan fluorozott vagy tercier-butilezett vegyületek oldhatósága és megoszlási hányadosa sokkal érzékenyebben reagál a víz jelenlétére, mint a „normál” szerves molekulák. Erre a felismerésre építve számos, ipari szempontból is értékes eljárást tettek fázisjelöltté, mint pl. a ketonok aszimmetrikus CBS redukcióját, a Wittig-reakciót és a Mitsunobu-reakciót, valamint a kereszt-kapcsolásos reakciókat. Különösen értékes e módszer abból a szempontból is, hogy az olcsó 3,5-bisztrifluorometil-brómbenzolt alkalmazták, mint kiindulási vegyületet. E fejlesztések mellett törekedtek továbbá új elválasztási technikák kidolgozására is. Így elsőként figyelték meg a korund alkalmazhatóságát szilárdfázisú extrakciónál. Méretnövelhető, folyadékmembránnal működő, extrakciós berendezést hoztak létre. A kidolgozott berendezés és eljárás környezetvédelmi szempontok alapján is előnyös. A munka eredményei két nemzetközi szabadalom beadását, illetve egy spin off vállalkozás elindítását tették lehetővé.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 24 MFt, ebből pályázati forrás: 6 MFt.*

#### *Szénhidrátkémiai kutatások*

A heparin szerkezet-hatás összefüggéseinek tanulmányozásával kapcsolatban folytatták az ortogonálisan védett oligoszacharidok előállítását. Négy olyan, ortogonálisan védett tetraszacharidot szintetizáltak, amelyekből a heparin összes - több mint ötszáz - tetraszacharid egysége előállítható.

Az ortogonális védőcsoportstratégiát sikeresen alkalmazták a heparin bioszintézisében szerepet játszó heparánáz enzim inhibitorainak szintézisére, e területen számos azacukor-tartalmú heparin-diszacharid analógot állítottak elő.

Kidolgoztak egy új védőcsoportot hidroxilcsoportok védelmére. Megállapították, hogy az általuk bevezetett 2-nitrofenilacetyl-csoport stabilis a legfontosabb kémiai átalakítások során, ugyanakkor szelektíven eltávolítható a leggyakrabban használt védőcsoportok mellől. Kimutatták továbbá, hogy az új védőcsoport ortogonális a heparin oligoszacharidok szintézisében eddig használt védőcsoportokra, ami lehetőséget ad az ortogonális védőcsoportstratégia további kiterjesztésére.

Génterápiás célokra nagyszámú, transzfekeziós vektorként alkalmazható, szénhidráttal módosított polimerszármazékot állítottak elő. Szisztematikusan változtatva a molekuláris paramétereket, részletesen vizsgálták e vegyületek hatás-szerkezet összefüggéseit géntranszfekeziós kísérletekben. Megállapították a maximális transzfekeziós hatékonysághoz szükséges molekulatömeget és szénhidráttartalmat. A szintetizált géntranszfekeziós vektorok között több olyan vegyület található, melyeknek hatékonysága meghaladja az irodalomból ismert leghatékonyabb vegyületekét.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült teljes ráfordítás: 30 MFt, ebből pályázati forrás: 20 MFt.*

#### *Természetes szerves vegyületek szintézise*

Az elmúlt évben a D-gyűrűben héttagú homoergolénváz kialakítására végeztek kísérleteket. Ennek során a már korábban előállított alfa-amino-Uhle ketont Michael-addícióban N-

alkilezték metil-vinil-ketonnal, majd a képződött diketonból aldol-kondenzációval próbálták meg kialakítani a homoergolén-vázat. Az elvégzett számos kísérlet ellenére ez a munka nem járt eredménnyel. A kívánt héttagú homológot végül is a dehidroergolén-vázra történő karbénaddícióval állították elő. Ezen eljárás segítségével alakították ki a D-gyűrűben 7 szénatomot tartalmazó D-homo-ergolinvázat. A módszer hasznosításával előállítottak néhány, a 9,10-kettőskötés helyére beépített ciklopropánnal kondenzált ergolin analogont. A cikloklavin első szintézisét publikálták 2008-ban a Tetrahedron c. folyóiratban.

Tovább vizsgálták a dialkilaminometil-indol-2-karbonsavészterek sajátos viselkedését, amikor is a dialkilaminocsoport igen enyhe körülmények mellett klórmetil-csoportra cserélhető.

Indolból és 5-szubsztituált (NO<sub>2</sub>, Cl) indolból kiindulva indolvázias 1,3-propándiolokat, indol-3-(2-hidroximetil-propán-1-ol)-származékokat állítottak elő. A BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszékével együttműködve, elvégezték ezen optikailag inaktív diolok enzimekatalizált enantioszelektív acilezését.

*Kutatói ráfordítás: 4,2 fő, ebből intézeti állományban: 4,2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 30 MFt, ebből pályázati forrás:*

#### *Nukleotidkémiai kutatások*

Új, 5-szubsztituált-pirimidin peptid-nukleinsav (PNS) építőegységek előállítását célzó munkájuk során, az uracil analogonok szintézisét követően, kísérleteket végeztek a megfelelő 5-szubsztituált-citozin PNS monomerek oldatfázisú szintézisére. Megállapították, hogy az alacsony hozamok miatt az U→C átalakítást inkább szilárd fázison célszerű végrehajtani az oligomerszintézis után. Az 5-aril-, ill. 5-alkinil-uracil bázisokat tartalmazó peptid-nukleinsavak, erős és szelektív hibridizációs tulajdonságuk folytán, elsősorban analitikai célra, géndiagnosztikai szerekként (pl. PNS mikrochipekben) alkalmazhatók különféle kórokozók kimutatására.

L-arabinózból kiindulva lineáris szintézis-stratégia alkalmazásával, három lépésben szintetizálták az N1-(béta-L-arabinofuranozil)-uracilt mint kulcsintermediert, amiből kiindulva, ortogonális cukor-védőcsoportok alkalmazásával, számos új 2'-, ill. 3'-módosított L-ribo- és L-arabino-nukleozid szintézise valósítható meg. A cukor-, ill. bázisrészen módosított L-nukleozidok között több jelentős antivirális aktivitással rendelkező analogon található. Ezeknek a vegyületeknek, nagyobb metabolikus stabilitásuk és kisebb toxicitásuk miatt, jobb a terápiás indexük, mint a természetes D-nukleozidoknak. Így a tervezett új származékok is ígéretes potenciális antivirális szereknek tekinthetők.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 24 MFt, ebből pályázati forrás:*

#### *Biológiai kémiai kutatások*

A világ éves gyógyszerforgalmának jelentős hányada peptid típusú gyógyszerek eladásából származik. A peptidek gyógyszerként történő használatát azonban számos kedvezőtlen fizikai-kémiai tulajdonságuk korlátozza. A peptidek hidrolitikus stabilitása általában kicsi (gyors a metabolizmus és a szervezetből történő kiürülés), emiatt orális alkalmazhatóságuk limitált. A peptidek célhelyre történő eljutását a sejtmembránon keresztül történő

transzportjuk szintén nehezíti. A felsorolt hátrányok leküzdésének egyik módja szénhidrát egységeknek a peptidláncba történő beépítése, ami megnöveli a peptidok *in vivo* élettartamát. A hidrolitikus stabilitás tovább növelhető C-glikozidok alkalmazásával. A C-glikozidos kötést tartalmazó glikopeptidek kémiai és enzimatis stabilitása jelentősen meghaladja az O-glikozidokét. A kutatócsoport alfa- és béta-glikozilnitrieket, majd a vegyületekből módosított Strecker-szintézissel glikoaminonitrieket állított elő. Ezekből a glikoaminosavak hidrolízissel és védőcsoport-eltávolítással érhetők el.

*Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 MFt, ebből pályázati forrás:*

#### *Biokémiai-farmakológiai kutatások*

A 2008. évben folytatták az ABC transzporterek (ABCC2/3; ABCB11) lejátszódo gyógyszer-interakciók vizsgálatát humán és patkány hepatocita szendvicskultúrában, kibővíve az ABCG2-vel. Kidolgoztak egy szkrínelésre alkalmas módszert, amely fejlesztés alatt álló potenciális gyógyszer-molekulák várható *in vivo* interakcióját jelzi a vizsgált transzporter a fejlesztés korai szakaszában, és segít a vezérmolekula kiválasztásában. A módszer szendvics-kultúrában tartott humán és patkány hepatocitákon teszteli a kérdéses transzporter specifikus szubsztrátjai eliminációjának változását a tesztanyag hatására. A módszer lehetővé teszi a bazolaterális és kanalikuláris transzporterek működésének egyidejű és egymástól független vizsgálatát. Az epébe történő kiválasztásban kiemelkedő jelentőségű ABCC2 és ABCB11 transzporterekre vonatkozó patkány hepatocita szendvicskultúra-vizsgálatok eredményeit több modellvegyület alkalmazásával sikeresen validálták *in vivo* patkánykísérletek segítségével. Ezek a tapasztalatok megerősítik a humán májsejteket alkalmazó módszer prediktív voltát az ember esetében.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 MFt, ebből pályázati forrás:*

#### *Gyógyszer-kölcsönhatások kutatása*

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

*Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 MFt, ebből pályázati forrás: - .*

#### *Molekuláris farmakológiai kutatások*

Indukált CD-spektrumok vizsgálatából megállapították, hogy a biliverdin és dimetil észtere erősen kötődnek az AAG F1/S genetikai variánsához. Kiszámították a kötődési paramétereket, azonosították a kötőhelyet.

Elsőként írták le nagyméretű szerves aranykomplex AAG-kötődését, jellemezve a kötődéssel járó optikai spektroszkópiai változásokat. Kiszámították a kötődési paramétereket, azonosították a kötőhelyet. A kötődés tényéből kiindulva új AAG homológiamodellt állítottak elő. Kimutatták, hogy AGP F1-S genetikai variánsán a deramciklán és annak enantiomerje eltérő kötődési interakciót mutat dikumarol antikoagulánsal.

Kidolgoztak egy kapilláris izoelektromos-fókuszálás metodikát az AGP genetikai variánsainak kimutatására.

Meghatározták a warfarin enantiomerek és ciklodextrin-származékok közötti kötődési állandókat az optimális elválasztás körülményei között. A kapilláris elektroforézis vizsgálatok eredményei alapján új, hatékony királis állófázist fejlesztettek ki, HPLC technikával tesztelték a kereskedelmi forgalomba kerülő új oszlop elválasztóképességét.

*Kutatói ráfordítás: 4,5 fő, ebből intézeti állományban: 4,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 14 MFt, ebből pályázati forrás: 8 MFt.*

#### *Neurokémiai kutatások*

Transzport-célfehérjék által szabályozott idegi folyamatok mechanizmusának jobb megértése céljából modellezték a gliális gamma-aminovajsav (GABA) transzporter altípusok (hGAT-2 és hGAT-3) GABA transzport mechanizmusának egyes lépéseit. Elektrofiziológiai módszerek alkalmazásával kimutatták a gliális glutaminsav (Glu) és a GABA-transzporterek aktiválásának hatására bekövetkező Glu-GABA cserefolyamat funkcionális hatását agyszövetben. Konfokális lézer-fluoreszcencia technika alkalmazásával észlelték és jellemezték az intercelluláris connexin-csatornákon keresztül bekövetkező kalciumion-hullám keletkezését agyszövetben.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 MFt, ebből pályázati forrás: 14 MFt.*

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

#### *Hazai kapcsolatok*

Az MTA-kutatóhelyekkel és a felsőoktatási intézményekkel igen széles körű együttműködések folytatnak, ezek mind az oktatás, mind a kutatás területére kiterjednek. Az oktatómunkában való intenzív részvételüket mutatja, hogy az intézet 8 kutatója rendszeresen végez oktatási tevékenységet az ELTE-n, ill. a Semmelweis Egyetemen. Az egyetemi kutatókkal összesen 15 közös publikációt jelentettek meg. A hazai kutatóhelyekkel folytatott együttműködések jelentős részben pályázatokhoz is kapcsolódnak. Az innovációban erősen érdekelt gyógyszeriparral közös kutatási programokat alakítottak ki.

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

Az MTA SZBK Enzimológiai Intézetével három különböző témában folytatnak eredményes kutatásokat: DNS metilezésének tanulmányozása, K-vitaminok meghatározása vérből, hibaként előforduló uracil kimutatása DNS-ből.

A Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával kialakított együttműködés keretében rendszeresen vizsgálják a transzplantációra kerülő (donor) máj gyógyszerlebontó (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a transzplantáción átesett betegek egyéni gyógyszeres terápiáját. Eddig öt közös publikációt jelentettek meg az együttműködés eredményeiről.

A „Humán Agyminta Bank” c. téma keretében (partner: Semmelweis Egyetem) megállapították, hogy a borostyánkósav specifikusan kötődik a humán nucleus accumbens agymintákból izolált szinaptikus membránfrakcióban.

A Szent István Egyetem Kémiai Intézetével a „(Nor)tropin(di)észterek és a glicin receptorhoz való kötődés vizsgálata” c. témában közös OTKA-pályázaton dolgoznak. Eddig egy közös publikációt jelentettek meg.

A Szent István Egyetemmel folytatott együttműködési témában („Idegi szubcelluláris frakciók elektronmikroszkópiája”) patkányagykéregből izolált szinaptikus membránfrakciót jellemeztek.

A Pannon Egyetem, Veszprém kutatóival közösen 6-merkaptohexil-2-(3,5-dinitro-benzamido) propanoát izotirónium só köztiterméken keresztül történő előállítására új eljárást dolgoztak ki.

A Solvo Biotechnology, Szeged céggel együttműködésben növényvédőszeres kölcsönhatását vizsgálták humán efflux transzporter (MDR1 (P-gp), MRP1, MRP2 és BCRP) fehérjékkel. Megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek az MDR1 szubsztrátjai, és e vegyületek módosítják a gyógyszerek bélben történő felvételét. Csekély mértékű szerkezeti változtatások jelentősen befolyásolják a kölcsönhatást az MDR1 efflux fehérjével. Az MRP1 transzportálja az acetoklór-glutation konjugátumot, megelőzve ezzel a toxikus akkumulációt. Ezek a transzportervizsgálatok hatékony eszközök lehetnek az újonnan kifejlesztett növényvédőszeres használatával járó kockázati tényezők előrejelzésében. A témából egy közlemény jelent meg a Toxicology c. folyóiratban.

A Servier Kutatóintézettel (Budapest) folytatott együttműködés eredményeként 2008-ban közös publikációt jelentettek meg.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet számos külföldi kutatóhellyel folytat tudományos együttműködést. 2008-ban összesen 28 fő külföldi tanulmányúton, ebből MTA-kétoldalú egyezményes keretben egy fő vett részt. Nemzetközi konferencián 24 előadást és 28 poszter-előadást tartottak.

A „Synthesis and receptor binding of new thieno[2,3-d]pyrimidines as selective ligands of 5-HT<sub>3</sub> receptors” c. együttműködési téma (együttműködő partnerintézmények: Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università di Catania; Istituto di Ricerche Farmacologiche „Mario Negri”, Milano; Department of Pharmacodynamics and Biopharmacy, University of Szeged; Institute of Pharmaceutical Chemistry, University of Szeged) eredményeiről 2008-ban közös publikációban számoltak be.

A „Hyperekplexia mutation R271L of alpha1-glycine receptors and [<sup>3</sup>H]strychnine binding” c. téma kutatásai (együttműködő partnerintézmény: Department of Neurochemistry, Max-Planck-Institute for Brain Research, Frankfurt) 2008-ban egy közös publikációt eredményeztek.

A „Nukleozid analogonok szintézise és antivirális hatásuk vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: Rega Institute for Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium) 2008-ban 35 nukleozid származékot állítottak elő. A vegyületek közül az egyik jelentős aktivitást mutatott HSV-1, HSV-2, ill. vaccinia vírusok ellen.

A „Reversal of Multi Drug Resistance” c. témában, EU-program keretében három külföldi egyetemmel (University of Lisbon, University of Reims, University of Marseille) folytattak közös kutatásokat.

A School of Pharmacy, University of London kutatóival „Szénhidrát-módosított peptidek kutatása” c. témában dolgoztak együtt.

Számos, potenciálisan gyógyszerhatóanyagként alkalmazható vegyületet szintetizáltak a Nycomed Deutschland GmbH (Konstanz, Németország) gyógyszergyár részére.

Az elmúlt évben megbízásos szerződés keretében jelentős volumenű szintetikus munkát végeztek a Sigma-Aldrich (Steinheim, Németország) cég számára.

Célzott biológiai vizsgálatok érdekében, számos vegyületet és különböző származékokat szintetizáltak a Bayer CropScience Co. (Frankfurt, Németország) és a Dupont Co. (USA) részére.

Kutatási együttműködést indítottak a Biopredic International biotechnológiai céggel, aminek a keretében azt vizsgálják, hogy helyettesíthetőek-e HepaRG humán májsejtekkel a primer hepatociták gyógyszer-interakciós vizsgálatokban.

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

##### *Hazai pályázatok*

Új, géntranszfekciós ágensek kifejlesztésére végzett vizsgálataikat az NKTH által támogatott konzorcium keretében, több partnerrel (Genetic Immunity Kft., Szegedi Tudományegyetem Bőr és Allergológiai Klinika, Kémiai Kutatóközpont Anyag és Környezetkémiai Intézet Polimerkémiai osztálya) együttműködésben végezték.

Az MTA SZBK Enzimológiai Intézetének kutatóival 2008-ban közös NKTH-OTKA-pályázatot nyújtottak be „Intracellular phosphorylation of nucleoside based anti-HIV drugs as a tool of inhibition of HIV reverse transcriptase” címmel.

Az „Új, gazdaságos elválasztási módszerek fejlesztése biztonságos élelmiszer-kiegészítők előállítására hazai természetű gyógynövényekből” c. Jedlik Anyos Program keretében elvégzett vizsgálatok eredményei alapján új, hatékony királis HPLC állófázist fejlesztettek ki, ami rövidesen kereskedelmi forgalomba kerül. Együttműködő partnerintézmények: Gradients

Termékfejlesztő Kft., CycloLab Kft., Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Delta Informatika Zrt.

A közös kutatási eredményekről három publikációban számoltak be.

Az „Új, gazdaságos elválasztási módszerek fejlesztése biztonságos élelmiszer-kiegészítők előállítására hazai termesztésű gyógynövényekből” c. Jedlik Ányos Program keretében 2008-ban a ciklodextrin származékok és a kumarin vegyületek közötti kölcsönhatás kapilláris elektroforézissel történő vizsgálatának eredményei alapján új, hatékony királis állófázist fejlesztettek ki, HPLC-technikával tesztelték a kereskedelmi forgalomba kerülő új oszlop elválasztóképességét.

A „Kardioprotektív nano-formulációk karotinoidok in silico módszerekkel segített molekuláris kapszulázása útján” c. Jedlik Ányos pályázati téma keretében 2008-ban számos új, vízoldható karotinoid-ciklodextrin komplex antioxidáns és stabilitás vizsgálatát végezték el, és tanulmányozták a komplexek aggregációs sajátságait.

A „Biológiailag jelentős nem-kovalens kölcsönhatások vizsgálata: fehérje-kötődés, nukleinsav-kötődés, önszerveződés” c. OTKA-pályázat keretében 2008-ban cirkuláris dikroizmus, abszorpciós, fluoreszcencia spektroszkópiás és kromatográfias módszerek alkalmazásával kimutatták és jellemezték gyógyszerek, epepigmentek és egy szerves aranykomplex emberi szérum alfa1-savanyú glikoprotein (AAG), valamint albumin kötődését. Új analitikai módszert dolgoztak ki humán AGP-variánsok vizsgálatára.

A Richter Gedeon Nyrt. által 2008. tavaszán „Gyógyszercélpont felfedezésére, azonosítására, validálására szolgáló kutatási javaslat és megvalósítási terv kidolgozása” tárgyban meghirdetett Richter Témapályázaton a „Design and Discovery of New Anxiolytics Acting via Astroglial Glutamate and GABA Transporters” címmel benyújtott pályázatukat a cég támogatásra érdemesnek ítélte.

2008. folyamán „Központi Fehérjeexpressziós Laboratórium” kiépítése kezdődött el azzal a céllal, hogy szerkezeti és biokémiai vizsgálatok kivitelezéséhez szükséges mennyiségű fehérjét bioszintetikus úton előállítsanak, majd izoláljanak és tisztítsanak. A beruházás első fázisában a 25 MFt értékű kutatóközponti beruházási támogatással beszerzett berendezések lehetővé teszik rekombináns fehérjék kész expressziós vektorokkal történő kifejezését E. coli sejtekben. A fehérjék izolálásához és tisztításához szükséges második fázis megindításának támogatására pályázatot nyújtottak be (22,8 MFt értékben).

#### *Nemzetközi pályázatok*

A STEROLTALK EU FP-6 program keretében 10 partner (7 ország) részvételével egy olyan tesztrendszer dolgoznak ki, amely alkalmas a vér koleszterinszintjét csökkentő gyógyszerek hatásának tanulmányozására és új gyógyszerjelölt vegyületek kiválasztására. A program elsődleges célkitűzése a gyógyszerhatásra bekövetkező koleszterinhomeosztázis-változások meghatározása transzkriptom, proteom és szterol-metabolom szinten.

Együttműködő partnerintézmények: Universitaet des Saarlandes, Saarbrücken; University of Ljubljana; CNRS, Centre de Génétique Moléculaire, Gif-sur-Yvette; Swansea Clinical

School, University of Wales Swansea; Karolinska Institutet, Huddinge University Hospital, Stockholm; Biozentrum, University of Basel; INSERM UMR, Montpellier; Lek Pharmaceuticals, Ljubljana; CREA, Ljubljana

A program keretében a vér koleszterinszintjét csökkentő gyógyszerek hatását tanulmányozták, az új gyógyszerjelölt vegyületek gyógyszer-interakciós sajátosságait és a koleszterin-homeosztázis-változásokat poszt-genomiális szinten értékelték.

A programban részt vevő kutatók eddig 18 közös publikációt jelentettek meg.

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

1. Tatai J, Fügedi P: Synthesis of the putative minimal FGF binding motif heparan sulfate trisaccharides by an orthogonal protecting group strategy, *Tetrahedron* 64 (42): 9865-9873 (2008)
2. Lengyel Gy, Veres Zs, Tugyi R, Vereczkey L, Molnár T, Glavinas H, Krajcsi P, Jemnitz K: Modulation of sinusoidal and canalicular elimination of bilirubin-glucuronides by rifampicin and other cholestatic drugs in a sandwich culture of rat hepatocytes, *Hepatology Research* 38 (3): 300-309 (2008)
3. Zsila F, Visy J, Mády Gy, Fitos I: Selective plasma protein binding of antimalarial drugs to alpha(1)-acid glycoprotein, *Bioorganic and Medicinal Chemistry* 16 (7): 3759-3772 (2008)
4. Incze M, Dörnyei G, Moldvai I, Major E, Egyed O, Szántay Cs: New routes to clavine-type ergot alkaloids. Part 2: Synthesis of the last, so far not yet synthesized member of the clavine alkaloid family, (+/-)-cycloclavine, *Tetrahedron* 64 (13): 2924-2929 (2008)
5. Filák L, Rokob TA, Vaskó GyÁ, Egyed O, Gömöry Á, Riedl Zs, Hajós Gy: A new cyclization to fused pyrazoles tunable for pericyclic or pseudopericyclic route: An experimental and theoretical study, *Journal of Organic Chemistry* 73 (10): 3900-3906 (2008)
6. Molnár T, Barabás P, Héja L, Kútiné-Fekete E, Lasztóczy B, Szabó P, Nyitrai G, Simon-Trompler E, Hajós F, Palkovits M, Kardos J: Gamma-hydroxybutyrate binds to the synaptic site recognizing succinate monocarboxylate: A new hypothesis on astrocyte-neuron interaction via the protonation of succinate, *Journal of Neuroscience Research* 86 (7): 1566-1576 (2008)



## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	97	Ebből kutató <sup>2</sup> :	57
PhD, kandidátus:	27	MTA doktora:	6
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			26
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			51
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			51
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	36
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1	idegen nyelven:	5
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	99,001	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	842
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			578
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	9
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	2	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	24	posztterek száma <sup>10</sup> :	28
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	3
		PhD-t:	25
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			274
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			475 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	5	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	150 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			8
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	19,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			5
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	54,2 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			2
EU-forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7,3 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			30
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	63,7 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

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

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

A Nanokémiai és Katalízis Intézet fő kutatási feladata 2008-ban nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása volt a nanokémia és a katalíziskutatás területén, különös tekintettel a határfelületekre, az aszimmetrikus katalízisre, a nanodimenziójú részecskékre és szerkezetekre.

A 2008. évi kutatási feladatokon belül nagyobb hangsúlyt kaptak a fém nanorészecske/hordozó határfelületek szerkezetének, adszorpciós tulajdonságainak megismerését célzó kutatások, a felületek fizikai és kémiai módszerekkel végzett funkcionálizálása és spektroszkópiai jellemzése.

Kiemelt figyelmet fordítottak azokra a heterogén katalitikus kutatásokra és fejlesztésekre, amelyek az energiaforrások, ezen belül a megújuló energiaforrások hatékonyabb hasznosításának megoldásaira vonatkoznak. Katalitikus vizsgálataikkal hozzá kívántak járulni a környezetvédelmi szempontból alapvető jelentőségű „zöld” kémiai eljárások, valamint a környezetkárosító emissziók ártalmatlanítását célzó eljárások tudományos megalapozásához. Az intézet feladata, hogy részt vegyen az egyetemi és a posztgraduális képzésben, valamint tanácsadással és gyakorlati kutatási-fejlesztési feladatok elvégzésével segítse a vállalkozásokat szakmai problémáik megoldásában.

Tudományos céljait, gazdálkodását, nemzetközi és vállalati kapcsolatait tekintve egyaránt fontos, hogy az intézet hazai és európai kutatási pályázatokban részt vegyen, és a támogatott pályázatokban vállalt feladatait magas színvonalon teljesítse.

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

A nanoméretből (1-100 nm) következő, sajátos anyagi tulajdonságok elsődlegesen határfelületi tulajdonságként nyilvánulnak meg. Az intézeti kutatási eredményeket a rokon területeken, ill. együttműködésben kifejtett tevékenység miatt előnyösen három tematikai főcsoportba gyűjtve lehet bemutatni. Ezek a „Határfelületi kémia”, a „Katalízis és felületkémia”, mely utóbbi terület a határfelületi jelenségek egy önkényesen elkülönített csoportja, valamint az „Új tulajdonságú anyagok” témacsoport. A területek, a számos átfedés mellett, egymást kiegészítve szorosan kapcsolódnak egymáshoz.

A határfelületi kémiai kutatások lényegében új korrózióvédelmi és gyógyászati alkalmazások tudományos megalapozását célozták.

A katalízis területen több energiavonatkozású téma indult vagy folytatódott, így, a biomotorhajtó-anyagok előállításának kutatása, továbbá a tüzelőanyag cella elektrokatalizátor, a hidrogénelőállítás és -tisztítás kutatása. Ezek a munkák még kezdeti szakaszban vannak, de a következő években várható a témák felfutása.

A beszámoló foglalkozik a rendezett és egységes mikro- és mezopórusos szerkezetű fém-oxidok (szilikátok és metalloszilikátok), valamint a különleges elektromos és mágneses tulajdonságú anyagok kutatása területén elért eredményekkel.

Az egyes témacsoportokba további kutatások is tartoznak, amelyeket az intézet hazai vagy nemzetközi résztvevők konzorciumában, európai uniós vagy hazai támogatású kutatási – fejlesztési projektek keretében végez.

### *Határfelületi kémia*

#### Korrózióvédelem

Nanorétegeket és nanoszerkezetű anyagokat, kompozitokat állítottak elő, ill. módosítottak. Meghatározták az anyagok szerkezetét és vizsgálták korróziógátló hatékonyságukat. Megállapították, hogy az új, korróziógátló anyagokkal és bevonatképző eljárásokkal környezetbarát, hatékony és gazdaságos korrózióvédelem valósítható meg.

A nanorétegek (Langmuir-Blodgett film, önszerveződött molekuláris rétegek) kutatása és alkalmazása lehetővé tette, hogy egyetlen molekuláris vastagságú felületi réteggel megátolják mind a kémiai, mind a mikrobiológiai korróziót.

Új, amorf szerkezetű, ferromágneses galvánbevonatokat állítottak elő és jellemeztek <sup>57</sup>Fe és <sup>119</sup>Sn Mössbauer-, röntgendiffraktometriai, elektrokémiai és egyéb mérésekkel. Az Sn-Co-Fe ötvözetbevonatokra összefüggést találtak a korrózióállóság és az előállításnál alkalmazott elektrolit áramoltatás sebessége, valamint a fázisösszetétel között. Az ötvözetek nemcsak korrózióálló bevonatként, hanem akkumulátorok elektródjaiként is gazdaságosan alkalmazhatók lehetnek.

#### Gyógyászati nanokémia

Aminosavak oldat/szilárd határfelületen lejátszódó adszorpcióját jellemezték összefrekvencia-keltési spektroszkópiával (SFG) hidrofil TiO<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub> és CaF<sub>2</sub> felületeken. Az eredmények hozzájárulhatnak a titán-dioxid biokompatibilitásának molekuláris szintű értelmezéséhez, ezáltal közvetetten segíthetik az eddigieknél előnyösebb tulajdonságú implantátumanyagok kifejlesztését.

Daganatellenes hatóanyag csomagolására és irányított célbajuttatására liposzómás rendszereket állítottak elő és minősítettek. A liposzómák méreteloszlását fényszórással, termikus sajátságait nagyérzékenységű kalorimetriával mérték. Megállapították, hogy a kiindulási foszfolipid-víz liposzómák (teljesen hidratált dipalmitoil-lecitin/víz rendszer) multilamellás formája a végső állapotban, azaz a szükséges, biológiailag aktív komponenseket tartalmazva, zömében unilamellás rendszerré alakul.

Gyógyszeripari tablettákon pozitronannihilációs spektroszkópiai mérésekkel megállapították, hogy összefüggés van a hordozó szabadterfogatának változása és a tablettá hatóanyag-

kibocsátási tulajdonságai között. Pontos szabadterfogat-eloszlásokat határoztak meg különböző hordozókra.

*Kutatói ráfordítás: 15 fő, ebből intézeti állományban: 13 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 69 MFt, ebből pályázati forrás: 60 MFt.*

### *Katalízis és felületkémia*

#### Hidrogénelőállítás, -tisztítás, tüzelőanyag-cella

Új, aktív, hordozós platinakatalizátorokat állítottak elő a platina nano-környezetének szabályozásával. Az irányított felületi reakciók módszerét – amelynek kidolgozása korábbi intézeti eredmény – alkalmazták alumínium-oxid és szilícium-dioxid hordozós ón-platina, kétfémes katalizátorok előállítására. Bizonyították, hogy a katalizátorokban, még magas óntartalom mellett is, az ón szelektíven, a platina nanorészecskéken képez ón-multiréteget. A módszert sikerült kiterjeszteni germánium módosítóra, valamint aktív-szén-hordozós platina-katalizátorokra is. Sikerült olyan szénhordozós ón/platina elektrokatalizátort előállítani, amelynek alkalmazása a Polimer Elektrolit Membrán (PEM) típusú tüzelőanyag-cellában bizonyult ígéretesnek. Új eredmény, a felületi fémorganikus kémia sikeres alkalmazása aktív-szén hordozón.

Többkomponensű katalizátorokat terveztek az etanol vízgőzös reformálásán alapuló hidrogéntermelésre a kombinatorikus módszer alkalmazásával. A kifejlesztett katalizátorokon 50%-os hidrogénhozamot értek el.

A szén-monoxid alacsony hőmérsékletű, szelektív, preferenciális oxidációjának nagy a jelentősége a nagytisztaságú hidrogén előállításában, amely a PEM-típusú tüzelőanyag-cella működéséhez szükséges. Az utóbbi időben megkülönböztetett figyelem irányul a reakcióban aktív arany nanokatalizátorokra.

A kombinatorikus módszer alkalmazásával a CO oxigénes oxidációjához V, Sm és Pb tartalmú, hordozós aranykatalizátort fejlesztettek. XPS-vizsgálatokkal bizonyították, hogy a Pb ötvözetet képez az arannyal, míg a többi komponens oxid formában módosítja az arany nanokörnyezetét. A katalizátoron jó szelektivitással szén-monoxidtól mentes hidrogént állítottak elő.

Új módszert dolgoztak ki arany nanorészecskék stabilizálására és a részecske méretének szabályozására szilikagél- és alumínium-oxid hordozón. *In situ* Mössbauer-spektroszkópiával vizsgálták az Au/SnO<sub>x</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátorok szerkezetét. Kimutatták, hogy a szén-monoxid alacsony hőmérsékletű oxidációs reakciójában az ón promoveálja a hordozós aranykatalizátort.

Aranyhordozón vas-oxid réteget alakítottak ki. Ezt az úgynevezett „inverz” modellkatalizátort XPS és SFG mérések együttes, *in situ* alkalmazásával vizsgálták az arany/átmenetifém-oxid CO oxidációs katalizátorok működési mechanizmusának jobb megértéséhez. Megállapították, hogy a CO a vékony (2 nm-es) vas-oxid rétegen kemisorbeálódik, de a vastagabb (8-10 nm-es) rétegen már nincs kimutatható CO adszorpció.

Vizsgálatokat végeztek az aktív arany nanokatalizátorok szerkezeti stabilitásának növelésére. Elektron-, foton-, és ion spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-mel

tanulmányozták az arany nanoszerkezetek képződését és sajátságait egykristály titán-dioxid felületen. Az arany mellé Mo-t vagy Rh-t adszorbeáltattak. A Mo adatom elősegítette az arany nanoklaszterek diszrapióját és hőstabilitását. A Rh adatom, amellet, hogy az arany szemcséket nanoméretben stabilizálta, megnövelte az egyes nanoklaszterek térfogatát.

Figyelemre méltóak a Mo<sub>2</sub>C katalitikus és felületi sajátságainak vizsgálatában elért újabb eredmények. A szénhordozó felületén létrehozott Mo<sub>2</sub>C nanorészecskék a nemesfémeknél katalitikusan aktívabb és stabilisabb felületi fázisnak bizonyultak hidrogén-előállításban etanolból, metanolból, illetve dimetil-éterből. Elektron-spektroszkópiai módszerekkel feltárták a Mo<sub>2</sub>C/Mo(100) felületen lejátszódó reakciók primér lépéseit és a felületen képződő gyökök átalakulásának irányát.

#### Nitrogén-oxidok szelektív katalitikus redukálása

A nitrogén-oxid szelektív katalitikus redukálásának mechanizmusát tanulmányozták metánnal, nagy oxigéntartalmú gázelegyben nitrogénné, indiumot, illetve indiumot és palládiumot tartalmazó zeolitkatalizátorokon. Pontosították a zeolitok és az In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> között lejátszódó ún. redukív, szilárd fázisú ioncsere-folyamat mechanizmusát. Megállapították, hogy az a szelektívebb In-zeolit katalizátor, amelynek In redoxi-centrumai lényegesen könnyebben oxidálhatók nitrogén-monoxiddal, mint oxigénnel.

#### Fotokatalitikus oxidáció

Titántartalmú MCM-41 típusú mezopórusos szilícium-dioxid anyagokat állítottak elő hidrotermális és szol-gél típusú szintézissel, valamint MCM-41 szintézissel és impregnálással. Az anyagokat katalizátorként használták víz 2,4,6-triklór-fenol szennyezőjének fotokatalitikus oxidatív lebontásában. Valószínűsítették, hogy a katalizátorok aktivitásában megnyilvánuló különbözősége a titán diszperzitás különbözőségéből következik és az elektron-elektron lyuk rekombináció sebességével lehet kapcsolatban.

#### Aszimmetrikus katalízis

A királis indukció, illetve a szubsztrátum-specifikusság eredetének leírására korábban kidolgozták az úgynevezett „árnyékoló hatás modellt” („Shielding Effect Model”). A modell lényege a reakcióba lépő prokirális molekula és a királis módosító között a folyadékfázisban végbemenő komplexképződés. A cinkonidin - Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> heterogén katalitikus rendszereket nem csak a magas optikai (> 90%) hozam, hanem a királis templát hatására fellépő sebességnövekedés is jellemzi. A sebességnövekedés eredetét magyarázó újabb elképzelésekben a cinkona alkaloid szerepe mindössze a katalitikusan aktív fém mérgeződésének megakadályozása. Bizonyították, hogy a jelenség ennél összetettebb, kialakulásához a szubsztrátum-módosító kölcsönhatások is hozzájárulnak. Az optikai hozam és reakciósebesség növekedéséről kimutatták, hogy az a cinkonidin dimer-monomer egyensúly eltolódásával hozható összefüggésbe.

*Kutatói ráfordítás: 17 fő, ebből intézeti állományban: 15 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 76 MFt, ebből pályázati ráfordítás: 5,2 MFt.*

#### Új tulajdonságú anyagok

Rámutattak, hogy a számítástechnikában alkalmazható, kolosszális mágneses ellenállású La<sub>0,8</sub>Sr<sub>0,2</sub>Co<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>O<sub>3</sub> (x = 0 - 0,3) perovszkitok fajlagos elektromos ellenállásának és mágneses ellenállásának hőmérsékletfüggése azt az elképzelést támasztja alá, hogy ezen anyagok olyan

granuláris szerkezettel bírnak, amelyben a nanoméretű fémes, és egyben ferromágneses, tartományokat szigetelő tartományok választják el egymástól.

Elsőként sikerült kimutatniuk az  $\alpha$ -vas részleges amorfizációját kisenergiájú nehézion besugárzás (ionimplantáció) hatására. Vasfelületre 14 nm vastagságú  $^{57}\text{Fe}$ -réteget párologtattak. Konverziós elektron Mössbauer-mérések eredményeivel bizonyították, hogy 80 keV energiájú Ar-ionokkal történő bombázás hatására az  $^{57}\text{Fe}$ -rétegben 15%-ban amorf vas keletkezik.

A Fe(III)-ion szerkezetét vizsgálták erősen bázikus ( $\text{pH}>13$ ), túltelített NaOH vizes oldatában Mössbauer-spektroszkópia, EXAFS, XANES és UV-spektroszkópia segítségével. Az oldatban megjelenő mikrokristályok új, eddig még nem azonosított fázist képeztek. Megállapították, hogy a Fe(III) a komplex sóban oktaéderes, míg az oldatban tetraéderes koordinációban van.

Vas-ftalocianinok pirolízisével szén nanocsöveket állítottak elő. Kimutatták, hogy a szénrétegek között olyan oxigén-képződmény keletkezhet, amelyre hőmérsékletfüggő spinátmenet jellemző.

Kimutatták, hogy a  $\text{K}^+$  -ionok a réteges szerkezetű szilikátásvány glaukonitok rétegei közé a glaukonitosodás folyamatában épülnek be. A beépülést az teszi lehetővé, hogy a rács oktaéderes  $\text{Al}^{3+}$  -ionjai részben  $\text{Fe}^{2+}$ -(és kisebb mértékben  $\text{Fe}^{3+}$ )-ionokra cserélődnek.

Szilícium vázatomok izomorf helyettesítésével bórtartalmú zeolitanalóg MFI-szerkezetű anyagokat és membránt szintetizáltak.

Egységes méretű mikro- és mezopórusok rendezett hierarchikus rendszerét tartalmazó MCM-22/MCM-41 kompozit anyagot szintetizáltak. Kimutatták, hogy az új anyag előnyös adszorbens és katalizátor, mivel anyagtranszport tulajdonsága kedvezőbb, mint az MCM-22 zeolité.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 24 MFt, ebből pályázati ráfordítás: 4 MFt.*

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

#### *Hazai kapcsolatok*

Az intézet eredményes együttműködést folytat a hazai egyetemekkel, más akadémiai intézetekkel, valamint iparvállalatokkal.

Az egyetemekkel való együttműködés kiterjed a közös kutatásokra, valamint az intézet kutatóinak részvételére az egyetemi oktatásban, doktori iskolákban, a PhD hallgatók témavezetésére és a minősítési eljárásokra. Az együttműködés különösen aktív az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel (ELTE), a Szegedi Tudományegyetemmel (SzTE), a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudomány Egyetemmel (BME), a Pannon Egyetemmel és a Semmelweis Egyetemmel.

Az egyetemi kutatókkal összesen 27 közös publikációt jelentettek meg 2008-ban.

A kiterjedt egyetemi kapcsolatok egy része abból ered, hogy az intézet Nukleáris Kémiai Laboratóriuma és Reakciókinetikai Laboratóriuma az ELTE-n, illetve a SzTE-en, az egyetemmel szoros kapcsolatot tartva végzi munkáját. A laboratóriumok a spektroszkópiai, ill. nukleáris kémiai szerkezetvizsgálati módszerek elméletét és gyakorlatát nagy óraszámban oktatják.

A Nukleáris Kémiai Laboratórium a Mössbauer-spektroszkópiát és a pozitron annihilációs spektroszkópiát az ELTE Kémiai-, Fizikai-, Földrajz és Földtudományi-, továbbá a Biológiai Intézetével együttműködve használja. A laboratórium a Kémiai Intézettel közösen a biológiai és környezetvédelmi szempontból érdekes vas- és ón komplexek reakciót vizsgálja, valamint elektrokémiai előállított ötvözetbevonatokat tanulmányoz. A Fizikai Intézettel közösen a nagyenergiájú nehézion besugárzás hatásának mérésével foglalkoznak, a Földrajz- és Földtudományi Intézettel együtt glaukonitokat és egyéb agyagásványokat vizsgálnak, a Biológiai Intézettel pedig növényélettani kutatásokat folytatnak. Az együttműködés eredményességét számos, egyetemi társszerzőséggel született közlemény igazolja. A Semmelweis Egyetem kutatásait a gyógyszertabletták porozítása és hatóanyag-leadása közötti összefüggés vizsgálatával segítik. Az SzTE Kémiai Intézetével együttműködve a vas szerkezetváltozásaival foglalkoznak extrémén lúgos vizes oldatokban. A Pannon Egyetem Kémiai Intézetével kooperálva, a Paksi Atomerőmű Zrt. megbízását teljesítve, atomerőművi gőzfejlesztők korróziós jelenségeit tanulmányozzák. A vizsgálatok eredményei meghatározóak lehetnek az erőmű élettartam-hosszabbítási tervei szempontjából.

Az intézet a BME-vel együttműködve, új, a levegő oxigén- és nitrogéntartalmának adszorpciós szétválasztására alkalmas, oxigénadszorpcióra szelektív szén adszorbensek előállítását és tulajdonságait tanulmányozta fa alapanyag termokémiai aktiválásával.

A Pannon Egyetem oktatási feladataiban való részvétel mellett az intézet az egyetem Kémiai Intézetével motorhajtó anyagok előállítása és finomítása katalitikus eljárásokkal témakörben dolgozik együtt.

Az intézet együttműködése hagyományosan jó az MTA Izotópkutató Intézetével (MTA IKI). Kooperációban Mössbauer spektroszkópia segítségével réteges szerkezetű  $\text{Me}^{4+}$ -foszfátokat vizsgálnak, továbbá az ón állapotát hordozós Sn, Sn-Pt és Sn-Au katalizátorokban. OTKA-támogatású közös kutatási projektek keretében inverz oxid/fém katalizátor modellrendszereket tanulmányoznak, illetve vassal izomorf módon szubsztituált, hierarchikus pórusrendszerű, MFI szerkezetű zeolitanalóg anyagokat szintetizálnak és jellemeznek.

Háromoldalú, nemzetközi és magyar vállalati (Bogdánypetrol Kft.) együttműködésben kétfémes katalizátorokat optimalizáltak olajok egy lépésben történő aromás- és kénmentesítésére.

A JOSAB Hungary Kft. megbízására szelektív adszorbenst fejlesztettek ki víz arzénmentesítésére.

Az intézet túlnyomórészt K+F-pályázati projektjei konzorciális ipari partnereivel áll kapcsolatban. Jelentősebb partnerei: MOL Rt., Paksi Atomerőmű Zrt., MAL Rt., KEMIKAL

Rt., Festékipari Kutató Kft., SZIKKTI Kft., BAYATI, Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológiai Intézet, TKI-Ferrit Kft., Megapharma Kft., TMP Titanium Metal Processing Kereskedelmi és Szolgáltató Kft, Egrokorr Rt., Poli-Farbe Vegyipari Kft., Elastico Kft., Nanochem Kft., Metal-Art Nemesfém Ipari Rt., S-Metalltech 98 Anyagtechnológiai Kutató Fejlesztő és Szolgáltató Kft.

### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet hagyományosan számos eredményes nemzetközi tudományos együttműködést folytat. A kapcsolatoknak TÉT-együttműködési, ill. kétoldalú, akadémiák közötti szerződések adnak keretet. Az intézet kutatói közül összesen 106-an vettek részt külföldi tanulmányúton, ill. konferencián, ebből öten MTA-egyezményes témában. Nemzetközi konferenciákon 66 előadást tartottak.

A TÉT Alapítvány támogatásával, a CNRS Le Mans-i Szilárdtestfizikai Kutatólaboratóriummal (Franciaország) együttműködve „Mágneses ellenállást mutató perovszkitok és biológiailag fontos vegyületek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” témában folyik kutatás. A kolosszális mágneses ellenállást mutató mintasorozatokon részletes Mössbauer-mérések történtek 78 K és 300 K között, valamint alacsony hőmérsékleten és nagy külső mágneses térben. A kutatás eredményeiből 3 közlemény született.

A TÉT Alapítvány támogatásával, az Olomüci Egyetemmel (Csehország) együttműködve „Biológiai és környezetvédelmi szempontból jelentős vas- és ón komplexek reakcióinak Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata” című témán dolgoznak. A 2008-ban indult együttműködés a hasonló című OTKA-projekthez kapcsolódik. A közös eredményeket nemzetközi konferencia előadásban mutatták be.

A TÉT Alapítvány támogatásával, a Buenos Aires-i Egyetemmel „Karbid katalizátorok vizsgálata” témában működnek együtt. A közös munka eredményeiből egy publikáció született.

A TÉT Alapítvány támogatja, a „Hordozós Pd katalizátorok vizsgálata in situ módszerekkel” című témában, együttműködés kialakítását a Bécsi Műszaki Egyetemmel. Az együttműködő partnerek közösen ERA Chemistry pályázatot nyújtottak be.

Az MTA és a Bolgár Tudományos Akadémia (BTA) kétoldalú egyezmény alapján támogatja a „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagként” című kutatást. Az intézet együttműködő partnere a BTA Szerves Kémiai Intézete (Szófia). A közös munka eredményeként 4 közlemény született.

Az MTA és a Román Tudományos Akadémia (RTA) kétoldalú egyezmény alapján támogatja az „Aktív fém-oxid katalizátorok vizsgálata különböző reakciókörülmények között in situ módszerekkel” című kutatási témát. Az együttműködő partner az „I. G. Margulescu” Fizikai-kémiai Intézet (Bukarest). A közös munka eredménye egy konferencia-előadás.

Az MTA és az Egyiptomi Tudományos Akadémia (ETA) kétoldalú egyezmény alapján támogatja a „Olajfinomítói szennyvizek szennyezőinek fotokatalitikus lebontása” című



kutatási témát. Az együttműködő partner az Egyiptomi Petróleum Kutató Intézet (EPRI, Kairó). A közös munka eredményeiből konferencia és szemináriumi előadások hangzottak el, és közlemény is készült.

Az MTA és a spanyol CSIC kétoldalú egyezmény alapján támogatja a „Nagyátersztő és kombinatorikus módszerek alkalmazása a heterogén katalízisben” című kutatási együttműködést. A partnerintézmény a Műszaki Kémiai Intézet (UPV-CSIC, Valencia). Többkomponensű, Au/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> alapú katalizátorokat terveznek CO preferenciális oxidációjára. Az egyezmény alapján támogatást kap a “Hordozós aranykatalizátorok előállítása és felhasználása oxidációs reakciókban” című kutatás. Az együttműködő partner a Katalízis és Petrolkémiai Intézet (Madrid). A kutatás eredményeiből 2008-ban konferencián előadást tartottak és 2 közleményt jelentettek meg.

Az MTA és az Orosz Tudományos Akadémia (OTA) kétoldalú egyezmény alapján támogatja a „Immobilizált heteropolisavak (HPA) és fémorganikus vegyületek alkalmazása szerves szintézisekben” című kutatási együttműködést. Az együttműködő partner a Boreskov Katalízis Intézet (Novoszibirszk). Az egyezmény alapján támogatást kap a „Növényi és bakteriális metabolitok fémekkel való kölcsönhatásának vizsgálata”. Az együttműködő partner a Biokémiai és Növényélettani Kutatóintézet (Szaratov). Megvizsgálták és leírták a vas(III)-komplex képződésének és redukciójának mechanizmusát, az indol-3-karbonsavat, ecetsavat, propionsavat, illetve butánsavat tartalmazó vizes oldatokban. A glutamin-szintetáz enzim <sup>57</sup>Co emissziós Mössbauer-vizsgálatával megállapították, hogy a két kation-kötőhely nem azonos affinitással köti meg a Co<sup>2+</sup> ionokat. A kutatási eredményekről két közleményt jelentettek meg.

Az MTA-OTKA-NSF mobilitási támogatásával a Floridai Technológiai Intézettel (Melbourne, FL) együttműködve “A Fe-EDTE és rokon komplexek hidrogén-peroxidos oxidációja mechanizmusának a vizsgálata” című témán dolgoztak. Közösen 3 publikációt jelentettek meg.

Külön támogatásban nem részesülő, kutatói kezdeményezésű együttműködések folytak a Glasgow-i Caledonia Egyetemmel, japán egyetemekkel (Tokió-, Kinki- és Ube), a Kolozsvári BB Egyetemmel, a Philadelphiai Drexel, a Brazíliai (Brasília), a Sao Paolo-i Műszaki és a Szófia Egyetemmel, valamint a Dubnai EAI Magreakciók Laboratóriumával. Ezekben az együttműködésekben 13 közlemény született.

Az intézet több külföldi cég kutatási-fejlesztési megbízásain is dolgozott. A Líbiai Petróleum Intézet (Tripoli) megbízására új, homogén katalitikus rendszert fejlesztett ki dízelolajok enyhe körülmények közötti oxidatív deszulfurálására. A Procter & Gamble Co. megbízására krómmentes, promoteált rézalapú katalizátorokat fejlesztettek ki zsírsav észterek alkohollá történő hidrogenolíziséhez.

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

##### *Határfelületi kémia*

###### Korrózióvédelem

NANOLAKK – Többfunkciós nanokompozitok festékipari alkalmazásokra. (JEDLIK projekt; száma: OM-00061/2007) A szol-gél technológiával előállított, alumínium-oxiddal kombinált titán-dioxid kompozitok előállítása lehetővé teszi a TiO<sub>2</sub> pigmenthez hasonló fedőképességű, korróziógátló hatású termék előállítását.

###### Gyógyászati nanokémia

EXCELL – Exploring Cellular Dynamics at Nanoscale (Sejtdinamika kutatás a nanotartományban, EU kiválósági hálózat (NoE) száma: FP7, CP-FP 214706-2) A projekt célja annak megértése, hogy nanoszerkezetek sejtekbe való beillesztése vagy sejtek/szövetek nanoszerkezetekkel való kontaktusa miképpen befolyásolja a sejtfunkciót és a molekuláris gépezetet (pl. gén és fehérje expresszió, metabolizmus, fiziológiai válaszok stb.).

MAGNESOM - Mágneses nanorészecskéket tartalmazó liposzómák fejlesztése, vizsgálata biomedicinális, elsősorban lokalizált hipotermiás alkalmazásokra. (JEDLIK projekt; száma: OM-00076/2005). Nanorészecskékhez kötött, molekulárisan célzott, daganatellenes jelátviteli gyógyszerhatóanyag és kapcsolódó diagnosztika integrált fejlesztése (lásd még a II. fejezetben).

##### *Katalízis és felületkémia*

ÚJBIOGO – Újgenerációs biohajtóanyagok (elsősorban biogázolaj) kifejlesztése. (JEDLIK projekt; száma: NKFP-A2-2006-0034) Eljárást fejlesztettek dízelolaj típusú, nagy cetánszámú, környezetbarát (kénmentes), cseppfolyós bio-motorhajtó-anyag előállítására növényolaj katalitikus hidrokonverziójával.

##### *Új tulajdonságú anyagok*

POLYCOND – Creating competitive edge for the European POLYmer processing industry driving new added-value products with CONDUCTing polymers. (EU integrált projekt; száma: FP6 NMP2-CT-2005-515835) Az európai polimerfeldolgozó ipar versenyképes ágazatának megteremtése új, nagy hozzáadott értékkel jellemezhető vezetőképes polimer termékek kifejlesztésével. A projekt célja az európai polimerfeldolgozó ipar nagy értékű, vezetőképes polimer termékeket előállító, versenyképes ágazatának megteremtése. A polimer/nanocső kompozitokból elkészítették néhány kereskedelmi termék prototípusát.

N2P - Flexible production technologies and equipment based on atmospheric pressure plasma processing for 3D nano structured surfaces (Atmoszférikus plazmakémiai leválasztáson alapuló rugalmas gyártástechnológia és berendezések 3D nanoszerkezetű felületek előállítására. (Nagyléptékű EU integrált projekt; száma: FP7, CP-IP 214134-2, N2P). A projekt célja Európa pozíciójának jelentős javítása a felületek háromdimenziós (3D) nanostrukturálása terén; tudományos, alkalmazott és ipari területen egyaránt. Az új, nagy áteresztőképességű, technológiai láncba illeszthető, atmoszférikus nyomáson működő plazmaleválasztásos technológiák kifejlesztése a napenergiára alapozott energiatermelés és az energiátároló eszközök fejlesztése területén jelenthet áttörést: elsősorban 3D-ben rendezett szén nanocsövek felhasználásával.

ALMAACID - L-almasav alapú biopolimerek előállítása és azok felhasználási lehetőségei a gyógyászatban és élelmiszeriparban. (JEDLIK projekt; száma: OM-00162/2007) A természetes alapú, almasavból kiinduló polimer előállítása azért fontos, mert alkalmazási lehetőségei igen széleskörűek (pl. felszívódó sebkötözés). A homo- és kopolimer előállításához sikerült egy nem-mérgező katalizátort kidolgozniuk.

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

1. Alagta A, Felhősi I, Bertóti I, Kálmán E: Corrosion protection properties of hydroxamic acid self-assembled monolayer on carbon steel, *Corrosion Science* 50(6): 1644-1649 (2008)
2. Somodi F, Borbáth I, Hegedűs M, Tompos A, Sajó IE, Szegedi Á, Rojs S, Fierro JLG, Margitfalvi JL: Modified preparation method for highly active Au/SiO(2) catalysts used in CO oxidation, *Applied Catalysis A-General* 347(2): 216-222 (2008)
3. Pászti Z, Keszthelyi T, Hakkel O, Gucci L: Adsorption of amino acids on hydrophilic surfaces, *Journal of Physics-Condensed Matter* 20(22): 224014 (2008)
4. Solt H, Lónyi F, Mihályi RM, Valyon J, Gutierrez LB, Miro EE: A mechanistic study of the solid-state reactions of H-mordenite with indium(0) and indium(III)oxide, *Journal of Physical Chemistry C* 112(49): 19423-19430 (2008)
5. Kuzmann E, Stichleutner S, Homonnay Z, Vértes A, Paszternák A, Nagy F, Felhősi I, Petó G, Telegdi J, Kálmán E: Amorphous iron formation due to low energy heavy ion implantation in evaporated Fe-57 thin films, *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 277(3): 699-702 (2008)
6. Óvári L, Bugyi L, Majzik Zs, Berkó A, Kiss J: Surface structure and composition of Au-Rh bimetallic nanoclusters on TiO<sub>2</sub>(1 1 0): a LEIS and STM study, *Journal of Physical Chemistry C* 112, 18011-18016 (2008)
7. Románszki L, Telegdi J, Kálmán E: Comparative study of Langmuir- and Langmuir-Blodgett layers of amphiphilic carboxylic- and hydroxamic acids, *Colloids and Surfaces A-Physicochemical and Engineering Aspects* 321(1-3): 20-28 (2008)
8. Farkas AP, Koós Á, Bugyi L, Solymosi F: Adsorption and reaction of methyl and ethyl iodide on potassium-promoted Mo<sub>2</sub>C/Mo(1 0 0) surface, *Journal of Physical Chemistry C* 112: 18502-18509 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Nanokémiai és Katalízis Intézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	93	Ebből kutató <sup>2</sup> :	60
PhD, kandidátus:	26	MTA doktora:	6
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			25
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			78
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			77
Ebből impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	50
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	2	idegen nyelven:	13
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	77,242	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	539
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			412
Magyarul könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	1
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	12
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	6	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	ebből külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	39	posztterek száma <sup>10</sup> :	27
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	11	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	19
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			10
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	0
		PhD-t:	16
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			415
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			481 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	4	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	400 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			12,8 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	33,3 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			11
NKFP:	11	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	164,6 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			8
EU-forrásból:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	108,8 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,4 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			52
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	80 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

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

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

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

Az intézet alapvető feladata: nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a molekulák és a szupramolekuláris szerkezetek, valamint anyagtudományi és biológiai vonatkozású összetett rendszerek sajátosságainak különböző spektroszkópiai és diffrakciós mérési módszerekkel, továbbá elméleti kémiai vizsgálatokkal történő feltárására.

Az intézet feladatai közé tartoztak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint hozzájárulás más kutatóhelyek kutatási-fejlesztési feladatainak elvégzéséhez. 2008-ban az intézet összetevékenységekben jelentős hányadot képviselt a más hazai, egyetemi és kutatóintézeti témákhoz kapcsolódó, kémiai szerkezetkutatási feladatokban való részvétel is. A kutatóhely számos témában folytat meghatározó jelentőségű tudományos együttműködések a Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai, valamint Nanokémiai és Katalízis Intézetével.

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

*ESR-spektroszkópiai kutatások*

Paramágneses fullerénvázas vegyületek és egyéb nano-struktúrák mágneses tulajdonságainak vizsgálata során, sikeresen kapszuláztak mágneses fulleréneket egyfalú nanocsövekben. Megállapították, hogy a nanocsövekben a  $N@C_{60}$  stabilabb mint kristályos  $C_{60}$  mátrixban, azaz az atomi nitrogén magasabb hőmérsékleten tud kiszabadulni. A  $N@C_{60}$  nanocsöbe ágyazott formája esetén, a nanocső vezetési elektronjaival való kölcsönhatás miatt, lényegesen rövidebb  $T_1$  relaxációs idő észlelhető.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 6 MFt, ebből pályázati forrás: 2 MFt.*

*Lézerspektroszkópiai kutatások*

Új, szupramolekuláris komplexet állítottak elő egy gyógyászati szempontból fontos izokinolinvázis alkaloid, a berberin és a kukurbit[7]uril merev makrociklusos vegyület önszerveződésével. Kimutatták, hogy a szupramolekula képződése szokatlanul nagy mértékű, kb. 500-szoros fluoreszcenciaintenzitás növekedést okoz, ami jól hasznosítható analitikai eljárások kifejlesztésére. A berberin–kukurbit[7]uril komplex stabilitási állandójának jelentős csökkenését tapasztalták nátriumionok és alkilimidazolium típusú ionfolyadékok hatására.

*Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 4 MFt, ebből pályázati forrás: 2,3 MFt.*

Meghatározták új, optikai szenzorokban alkalmazható, királis, szupramolekuláris receptorok komplexképzési reakcióinak jellemzőit (egyensúlyi állandók, enantioszelektivitás, reakciósebesség). Felderítették új királis vegyületek (foszfolének) abszolút konfigurációját CD-spektroszkópiai kísérletekkel és elméleti kémiai számításokkal.

Tanulmányozták a molekulák sztérikus sajátságának a fémkomplexek önszerveződési reakciójában történő megnyilvánulását. Kimutatták, hogy egy új, terminális piridilcsoportokat, valamint láncközi iminonitrogéneket tartalmazó ligandum primer koordinációs helye, az iminonitrogéneknél fellépő keláteffektus ellenére is, a sztérikusan kevésbé gátolt piridilcsoport. Megállapították azt is, hogy két különböző térigényű komplex jelenlétében ezek méret szerinti szelektív koordinációja valósul meg.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 6 MFt, ebből pályázati forrás: 2 MFt.*

Az eddig szintetizált mintegy 180 zeolitváz közül csupán három szerkezet mutatott királis tulajdonságokat. Két új, porózus, tetraéderes vázú (SU-32 és SU-15 fantázianevű; SU-32:  $[H_3NCH(CH_3)_2][Ge_{5.28}Si_{14.72}O_{20}]$ , ill. SU-15:  $[H_3NCH(CH_3)_2][Ge_{5.90}Si_{14.10}O_{20}]$  összetételű) szilícium-germanátot szintetizáltak, és megállapították, hogy az SU-32 A-polimorf módosulatának belső királis szerkezete van. A szerkezetet szabályozó ágens, a diizopropil-amin termikus eltávolítását egy-egy 80-100  $\mu$ m-es átmérőjű egykristály FTIR-mikroszkópiás vizsgálatával követték a hőmérséklet függvényében. Megállapították, hogy az SU-15 mintából 300 °C-nál, míg a SU-32 zeolitból 400°C-on teljesen távozott a diizopropil-amin, ill. annak különböző bomlástermékei, ugyanakkor a zeolitszerkezet sértetlen maradt.

Továbbfejlesztették az infravörös spektrumok sávpolarizációs irányainak meghatározására az előző években kifejlesztett kísérleti/elméleti kombinált módszert, amely anizotróp (nematikus folyadékkristályos) oldatok polarizált IR-spektrumainak mérésén és a molekularezgések elméleti számításán alapul. Az oldatban uniaxiálisan orientált molekulák irányfüggő spektrális sajátságait a szabad molekulára, illetve a közeghatást is figyelembe vevő (szolvatációs) modellekre vonatkozó számításokkal közelítették. Aszimmetrikus naftalin-izotopológok vizsgálatával kimutatták, hogy az elméleti predikciók már közepes szintű DFT-számítások esetén is nagyon jó eredményt adnak. A szokásos izotróp szolvatációs modellek (pl. az IEF-PCM) nem javítottak az rezgési átmenetmomentum-irányok leírásának pontosságán; előrelépés az anizotróp IEF-PCM modelltől várható.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 3 MFt, ebből pályázati forrás: -.*

### *NMR-spektroszkópiai kutatások*

Meghatározták az endogén kalpain inhibitor, a kalpasztatin evolúciósan konzervált A és C szubdoménjéből származtatott peptid (SGKSGMDAALDDLIDTLGG és SKPIGPDDAIDALSSDFTS) szerkezetét vizes pufferban,  $CD_3OH/H_2O$  1:1 elegyen és két ekvivalens  $Ca^{2+}$  jelenlétében. A peptid NMR-vizsgálata alátámasztja a hipotézist, amely szerint az eredendően rendezetlen kalpasztatin fehérje *apo* állapotában megvan a hajlam ugyanazoknak a másodlagos szerkezeti elemeknek a kialakulására, mint amelyeket a *holo* formában a partnerfehérjéhez történő kötődés indukál. Az NMR-vizsgálatok rámutattak arra is, hogy mindkét peptid kalciumionokat köt, ami a hélixek destabilizálódásához vezet a metanolos oldatban.

Enantioszelektív, tiokarbamid módosított 9-*epi*-cinchona alapú organokatalizátorok oldat-szerkezetét határozták meg nagyfelbontású NMR-módszerekkel, bonyolult intra- és intermolekuláris cserefolyamatok együttesében. Felismerték, hogy a vizsgált katalizátorok oldatban dimer asszociátumokat alkotnak, ami összefüggésben áll a molekulák bifunkcionalitásával és konformációs szabadsági fokával. A felfedezett dimer asszociátumok szerkezetét pontos  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  atomi távolságok mérésével és kiértékelésével végezték alacsony hőmérsékletű ( $-80^\circ\text{C}$ ) NOESY mérések segítségével. A kapott szerkezetek értékes modelljei a szerves kémiai reakciók mechanizmusát és kinetikáját vizsgáló kutatásoknak a hatékonyabb katalizátorok tervezésében.

*Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban: 6 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 18 MFt, ebből pályázati forrás: 2 MFt.*

#### *Röntgendiffrakciós kutatások*

2008. év folyamán új mérési és számítási technikákat vezettek be és alkalmaztak. Képlemez-térdektort használtak egykristályok, porok és folyadékok röntgenszórásának vizsgálatára. Szilárdfázisú reakciókat végeztek komplexekben. Meghonosították a krisztallográfiai fázisprobléma megoldásának új módszerét, fejlesztették a korlátozott fölbontású szórással bíró anyagok szerkezetvizsgálatát. Szupramolekuláris átalakulások rendszerezésére alkalmazták a morfortrópia - izostrukturalitás antinómia módszerét. Új típusú ionos - molekuláris rendszerek, komplexek kialakítását kezdték meg, egyes esetekben nemes-, átmeneti-, ill. alkáli-fém komplexek létrehozásával együtt.

Folytatták egyes önszerveződő szupramolekuláris rendszerek szerkezetének meghatározását, a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzését.

*Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 MFt, ebből pályázati forrás: 2,5 MFt.*

#### *Tömegspektrometriai kutatások*

Az alfa-1-savas glikoprotein tumormarker genetikai variánsainak vizsgálata során megállapították, hogy a rákos betegek és a kontrollcsoport genetikai variánsainak (ORM1/ORM2) arányában statisztikailag szignifikáns eltérés mutatható ki. Ezen kutatások mind a tudomány, mind az orvosi gyakorlat számára rendkívül fontosak. Kutatásaik a rákos folyamatok biokémiájának megértését segítik, aminek eredményeképpen lehetőség nyílik a daganatos megbetegedések kezelésére szolgáló gyógyszerek tervezésére. Másrészt pedig, a kidolgozott módszer a mindennapi orvosi gyakorlatban alkalmazható gyors, pontos diagnosztikai eljárásként.

A glikopeptidek energiafüggő, tandem tömegspektrometriás vizsgálata révén, módszert dolgoztak ki a glikopeptidek glikozilációs mintázatának torzítatlan meghatározására. Ez a módszer lehetőséget nyújt a diagnosztikai értékű glikoproteinek ún. helyspecifikus glikozilációs mintázatának vizsgálatára.

*Kutatói ráfordítás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 MFt, ebből pályázati forrás: 22 MFt.*

## *Elméleti kémiai kutatások*

Kvantumkémiai számítások alapján javaslatot tettek a nagy térkitöltésű Lewis sav–bázis-párok („frusztrált Lewis párok”) hidrogénnel és olefinekkel történő reakciójának mechanizmusára. Megállapították, hogy a folyamatban kulcsszerepet játszik a sav és a bázis nemkovalens asszociátuma, ami lehetővé teszi a Lewis-centrumok kooperativitását. A reakciók mechanizmusának értelmezése sikeresen felhasználható új és feltételezhetően gazdaságos katalitikus eljárások kidolgozásában, ugyanis a legújabb kísérletek szerint a frusztrált Lewis-párok hatékony katalizátorként alkalmazhatók telítetlen vegyületek hidrogénezésében.

Pirazinil-ke-ton arilhidrazonok gyűrűzáródási reakciójában elméleti számításokkal igazolták savak vagy bázisok katalitikus hatását, valamint kimutatták, hogy a reakció a közeg milyenségétől függően periciklusos vagy pszeudopericiklusos mechanizmus szerint egyaránt végbemehet.

Az acetaldehid etilén és víz reakciójával történő előállítására a Wacker cég fejlesztett ki egy ipari eljárást. A katalitikus folyamat mechanizmusának Car-Parrinello molekuláris dinamikai szimulációs módszerrel történő vizsgálatával megállapították, hogy a külső-szférás sebességmeghatározó lépés sokkal valószínűbb, mint a belső-szférás mechanizmus.

Pt(II)-kation hidrátszférájának szerkezetét és rezgési sajátosságait határozták meg számítással és méréssel. Megállapították, hogy – ellentétben a legfrissebb EXAFS-mérésekkel – a szimuláció tetragonális, és nem oktaéderes hidrátszférát jósol, ami viszont összhangban van a rezgési spektrummal. Kimutatták, hogy a hidrátburokban lévő vízmolekulák savassága jelentősen megnő, és protoncserében vesznek részt a második hidrátszféra vízmolekuláival.

Kvantumkémiai számítások segítségével – a kísérleti vizsgálatokkal párhuzamosan – azonosították azokat az alapvető reakciólépéseket, amelyekben a természetes vizeket szennyező naftil- és benzolszulfonsav-származékok titándioxid és fény alkalmazásával szervesetlen vegyületekké (H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>) bonthatók.

Kvantumkémiai számítások segítségével meghatározták Hg(II) és porfirin különböző összetételű komplexeinek szerkezetét, és értelmezték fotofizikai, valamint fotokémiai tulajdonságaikat.

A szénhidrogének égési folyamataiban jelentős elemi reakciók elméleti reakciódinamikai vizsgálata során megállapították, hogy a szénhidrogének oxidációjában mindig előforduló <sup>3</sup>O és etilén reakciójában olyan jelentős mértékben (kb. 50%) történik triplett–szingulett átmenet, hogy az alapvetően befolyásolja az oxidációs termékek összetételét.

Meghatározták a molekulaorientáció és a lézerpolarizáció hatását a CH<sub>2</sub>BrCl-molekula disszociációjának koherens szabályozására, és ezek figyelembevételével optimalizálták a szabályozási eljárást. Feltárták a halometán-molekulákon (CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>BrI) időfelbontásos mérések során észlelt dinamikus rezonanciák eredetét, és értelmezték főbb jellemzőit.

Az „atomi egységfelbontás” segítségével matematikailag újrafogalmazták az effektív atompályák problémakörét, ami lehetővé tette az „effektív minimál bázis” definiálását a „fuzzy atomok” esetére is.



Általánosították a „redukált rezolvens” formalizmust az intermolekuláris kölcsönhatások vizsgálatánál fellépő nem-ortogonális bázisban alkalmazandó biortogonális perturbációs elmélet esetére.

*Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 17 MFt, ebből pályázati forrás: 8,5 MFt.*

#### *Folyadékdiffrakciós kutatások*

Önszerveződő szupramolekuláris rendszereket (platinakomplexek, aranykomplexek, palládiumkomplexek) vizsgáltak, és meghatározták a komplexek szolvátburkának szerkezetét. Az aranykomplexek mérési eredményeivel sikerült nemlineáris optikai tulajdonságaikra egy lehetséges magyarázatot adni.

A tömény nátriumhidroxid vizes oldatok szerkezetének ismeretét az alumíniumgyártás során történő alkalmazás teszi indokolttá. Megmutatták, hogy a koncentráció változásával hogyan változik a nátriumion hidrátszférája és az ionpárok mennyisége. Kimutatták, hogy a hiperkoordinált hidroxidion közepes és alacsony koncentrációkban kielégítően leírja a hidratált hidroxidion szerkezetét. Ennek ismeretében tömény lúgos oldatok, mint például a gallátoldatok is tanulmányozhatók. Víz-metanol, valamint víz-formamid elegyeket röntgendiffrakcióval és molekuláris dinamikai szimulációval tanulmányoztak. Vizsgálták a hidrogénkötéses hálók kialakulását az irodalomban már bevált módszerekkel. Egy új statisztikai módszer segítségével az eddig ismerteknél részletesebb szerkezeti leírást adtak. A hidrogénkötéses rendszerek ismerete biológiai alkalmazásokban jelentős.

*Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 6 MFt, ebből pályázati forrás: 3 MFt.*

#### *Szupramolekuláris kémiai kutatások*

Változatos tagszámú és alakzatú, potenciálisan számos gyakorlati célra alkalmazható arany(I) szupramolekulákat állítottak elő. Megfigyelték az arany(I) szupramolekulák esetében nagyon ritka, spontán rezolválódást. Egykristály röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatokkal bizonyították, hogy a spontán rezolválódás folyamatát a szupramolekula anionja és az alkalmazott oldószer milyensége nagymértékben befolyásolja.

Megállapították, hogy a triorganoón(IV)-vegyületek csoportvándorlással járó kristály-olvadék-kristály átalakulását a metil-szubsztituensek és oxigén-donorok molekulán belüli együttes jelenléte teszi lehetővé.

*Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 2,5 MFt, ebből pályázati forrás: 1,5 MFt.*

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

#### *Hazai kapcsolatok*

Az intézetnek széles körű kapcsolatai vannak a hazai egyetemekkel és az MTA-támogatású kutatócsoportokkal. Mind a tudományos kutatási, mind az oktatási együttműködések jelentősek. Az együttműködés eredményességét a 2008-ban egyetemi kutatókkal közösen

megjelent 25 tudományos publikáció is mutatja. Tevékeny részt vállalnak az egyetemi oktatásban. Az intézet 13 kutatója oktat rendszeresen különböző egyetemeken. Elsősorban a BME-vel alakultak ki kölcsönösen előnyös kutatási és oktatási kapcsolatok. Ebben fontos szerepet játszik az intézet és a BME közös lézerspektroszkópai laboratóriuma.

A BME-vel és a Szegedi Egyetemmel közösen öt folyóiratcikket jelentettek meg 2008-ban különböző spektroszkópai kutatási témákban.

A Semmelweis Egyetem kutatóival együttműködésben a sejtek közötti kommunikáció feltérképezéséhez tömegspektrometriai módszereket alkalmaztak. Kidolgozták a mikrovezikulumok proteomikai és metabolomikai vizsgálatához szükséges mintaelőkészítési módszereket.

A Pannon Egyetem, Szerves Kémia Tanszékével és a MÜKKI-vel együttműködésben spektroszkópai vizsgálatok témakörében két közös publikációt közöltek.

Az „Átmenetifém-komplexek alap- és gerjesztett állapotai szerkezetének és fotokémiai tulajdonságainak vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: Pannon Egyetem, Veszprém) több Hg(II)-porfirin komplexet állítottak elő, megállapították fotofizikai és fotokémiai tulajdonságaikat, és azokat kvantumkémiai számítások segítségével értelmezték. A „Naftilszulfonsav származékokkal szennyezett természetes vizek fotokémiai tisztítása” c. témában két közös publikáció született.

A Richter Gedeon Nyrt. részére speciális – nagy szaktudást igénylő – tömegspektrometriás méréseket végeztek.

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet nemzetközi kapcsolatai rendkívül sokrétűek és eredményesek. A kutatólaboratóriumok a megfelelő szakterületek minden jelesebb kutatóhelyével kapcsolatban állnak. Számos meghívás és 25 közös publikáció mutatja az együttműködések eredményességét. 2008-ban összesen 88 külföldi tanulmányutat tettek, ebből MTA-egyezményes utazás 17 témában volt. Az intézet kutatói 44 előadást és 34 poszter-előadást tartottak nemzetközi konferenciákon.

Több külföldi egyetemi kutatóhellyel együttműködésben (Université de Provence, Marseille; The Ohio State University; Medical College of Wisconsin, Milwaukee, USA; Eindhoven University of Technology, Hollandia; University of Rosario, Argentína) „Reaktív oxigén specieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata” c. témában két folyóiratcikket jelentettek meg.

MTA-kétoldalú, egyezményes együttműködés keretében, a „Spinzondák és spinjelölések alkalmazása” c. témában (együttműködő partner: Department of Physics, Indian Institute of Science Bangalore, India) spinzondák ESR-spektrumaiból szimuláció segítségével meghatározták a rotációs korrelációs időket. Az így meghatározott korrelációs idők alkalmasnak bizonyultak szilárd polimer-elektrolitok fázisátmeneteinek követésére.

Az „Alkaloidok fény hatására végbemenő folyamatai biológiai fontosságú rendszerekben” c. témában (együttműködő partner: Max-Planck Institute for Bioinorganic Chemistry,

Németország) MTA – DFG együttműködés keretében kimutatták, hogy a koralin nevű benzo[c]fenantridin típusú alkaloid dimerizációját elősegíti az erős kötődés negatív töltésű poliszacharidokhoz. Az ízületi problémák megelőzésére és kezelésére használt kondroitin-szulfát esetén pH-függő kölcsönhatást találtak. Megállapították, hogy a B2-vitamin bomlásterméke, a lumikróm stabil beékelődési komplexet alkot kukurbit[7]uril makrociklusos vegyülettel, és ez a folyamat a lumikróm részleges tautomerizálódására vezet. Az eredményekről nemzetközi konferencián számoltak be. Két publikáció közlés alatt van.

MTA-BTA kétoldalú egyezmény keretében orientált molekulákat tanulmányoztak infravörös lineáris dikroizmus alapján, elméleti számítások segítségével. Az együttműködő partnerrel (Institute of Organic Chemistry, BAS, Szófia) előadást tartottak a XXIX EUCMOS, Opatija 2008 konferencián.

Román-magyar Tét-együttműködés keretében (együttműködő partner: National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies, Kolozsvár, Románia) biológiai minták nagyméretű (kb. 1GB) HPLC-MS felvételeinek értékelését segítő programot dolgoztak ki.

Ukrán-magyar MTA-kétoldalú megállapodás részeként (együttműködő partner: B.Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Harkov, Ukrajna) a biológiai rendszerekben fontos szerepet betöltő molekulák gázfázisú ionkémiai tulajdonságait vizsgálták tömegspektrometriai és elméleti kémiai módszerekkel.

Az „Új tulajdonságú anyagok a szupramolekuláris és szilárd fázisú kémiában” c. magyar – dél-afrikai Tét-együttműködés keretében (együttműködő partner: University of Cape Town, Dél-Afrika) folytatott kutatási téma eredményeként, egy alfa-(4-piridil)benzohidrol származék sósavas sójának szublimációját vizsgálva tapasztalt orientált kristálytranszformáció jelenségét a parciális izostrukturalitás felismerésével megmagyarázták. Elkezdték ciklodextrin gyógyszerhatóanyagokkal képzett zárványainak és polimorfjainak előállítását, szerkezet- és izostrukturalitás vizsgálatát. Az eredményeket egy dolgozatban és három előadásban foglalták össze.

Magyar-dél-afrikai Tét-egyezmény keretében az „Alkánok katalitikus aktiválása” c. témában (együttműködő partner: Department of Chemistry, University of Cape Town) CpM(CO)<sub>2</sub>Me típusú vegyületeket szintetizáltak (M=Fe, Ru), majd ezekből kiindulva foszfinok alkalmazásával sikerült acilezési reakciókat megvalósítani, vagyis előállítani a CpM(CO)(PPh<sub>3</sub>)(COMe) intermediereket. Ezeket a vegyületeket protonálási reakciókban alakították tovább CpM(CO)(PPh<sub>3</sub>)(C(OH)Me)<sup>+</sup> típusú kationos komplexekké.

MTA-DFG-egyezmény keretében a „Halometánok: kvantumkémiai és kvantumdinamikai számítások a fotodisszociáció lézeres szabályzására” c. témában (együttműködő partner: Institute of Physical Chemistry, Friedrich-Schiller-University Jena, Németország) két-dimenziós kvantumdinamikai számításokkal feltárták a nem-adiabatikus átmenetek szerepét a CH<sub>2</sub>BrCl-molekula UV-fotodisszociációjában és két-impulzusos koherens szabályzási eljárást dolgoztak ki a fotodisszociáció szelektív tételére. A molekula-orientáció és a lézerpolarizáció figyelembevételével a disszociáció szelektivitását egy nagyságrenddel sikerült megnövelni. Két közös publikációt jelentettek meg.

MTA-CNRS együttműködés eredményeként (partner: CEA-Saclay, LLB, Franciaország) 2008-ban egy közös publikációt jelentettek meg.

MTA-DFG együttműködés (partner: University of Regensburg, Department of Theoretical Chemistry) során 2008-ban egy közös publikációt közöltek.

Az MTA-DFG-egyezménybe foglalt „Poliatomos oxoanionokat tartalmazó vizes és nemvizes oldatok szerkezeti jellemzése elméleti és kísérleti módszerekkel” c. téma tanulmányozása során különböző koncentrációjú  $\text{NaNO}_3$ -oldatok röntgendiffrakciós és neutrondiffrakciós mérését, valamint Car-Parrinello molekuláris dinamikai szimulációját végezték el. A klasszikus molekuláris dinamikai szimulációt a német partner végezte. Az elméleti és a kísérleti adatok összehasonlításáról közös publikációban számoltak be.

MTA-CNRS-egyttműködés keretében cink-klorid oldatok szerkezetét tanulmányozták vizes oldatokban neutrondiffrakciós módszerekkel.

Magyar-osztrák TÉT-egyttműködésben az „Arany szolvatációjának tanulmányozása poláros és nempoláros oldószerekben” c. témában elvégezték arany(I)-klorid, valamint kálium-diciano-aurát(III) nemvizes (metanol, nitrometán) oldatainak röntgendiffrakciós mérését. Az arany(I)-, valamint arany(III)-ionok molekuláris dinamikai szimulációjához szükséges klasszikus potenciálok illesztésére, ab initio számítások eredményeire építve, az osztrák partnerrel együttműködésben került sor. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA partnerrel együttműködésben klasszikus- és kvantummechanikai, reakciódinamikai számításokkal megállapították, hogy az égések kémiájában alapvető ( $\text{H} + \text{O}_2$ )-reakcióban az oxigénmolekula forgási gerjesztettsége olyan mértékben növeli a reakciósebességet, hogy azt a modellszámításokban figyelembe kell venni. Két közös publikációt közöltek.

A Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, IL, USA kutatóival elméleti, reakciódinamikai vizsgálatokat végeztek. Az eredményeket közös publikációban foglalták össze.

Meghatározták, hogy a  $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$  és a  $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ -komplexekben a Ponc-féle átlagolt Fermi-lyuk analízis alapján milyen a fém-terminális ligandum, a fém-hídligandum és az esetleges fém-fém kötés természete. (Együttműködő partner: Institute for Chemical Process Fundamentals, Czech Academy of Sciences, Prága). Az eredményekről egy közös publikációban számoltak be.

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

##### *Hazai pályázatok*

A „Bioligandumok fémkoordinációjának termodinamikai vizsgálata ESR-spektroszkópiával” és a „Koordinációs viszonyok és konformációs egyensúlyok vizsgálata aliciklusos beta-aminosav származékok réz(II) komplexeinél kétdimenziós ESR-spektroszkópiai módszerrel” c. OTKA témákban elért eredményekről két dolgozatot állítottak össze.

OTKA-pályázati téma („Fény hatására végbemenő folyamatok önszerveződő rendszerekben”) kutatásainak során feltárták, hogy a szupramolekuláris komplexek szerkezete miként befolyásolja a fényelnyelést követő folyamatok sebességét.

Királis szupramolekuláris rendszerek optikai jellemzőit határozták meg a „High-accuracy models in theoretical chemistry and their applications to spectroscopy” c. OTKA-téma keretében.

A Szegedi Tudományegyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének kutatóival folytatott együttműködés eredményeként két publikációt közöltek 2008-ban.

Jedlik Ányos pályázat keretében a „Molekuláris célpontok és biomarkerek azonosítása kóros elhízás mechanizmusában és gyógyításában” c. témában (együttműködő partner: Richter Gedeon Nyrt.) a kóros elhízásban szenvedő betegek vérplazma proteomjának és zsírsavprofiljának vizsgálatához szükséges analitikai vizsgálati módszereket dolgoztak ki. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A „Biomolekulák szerkezetének és kölcsönhatásainak vizsgálata informatikai és tömegspektrometriai módszerek együttes alkalmazásával” c. OTKA-pályázat kutatásai során továbbfejlesztették a peptidfragmentáció elméleti leírására alkalmas programot. A módosítás eredményeként a program más típusú tömegspektrométerek (pl. ioncsapda) esetén is alkalmazható. A glikopeptidek tömegspektrumának értékelésére egy új, számítógépes programot dolgoztak ki, amit sikeresen alkalmaztak az AGP enegiafüggő glikopeptidjeinek vizsgálatára.

A „Cinkiont tartalmazó oldatok és felületek szerkezetkutatása” c. OTKA-pályázati téma kutatásainak során megállapították, hogy Pd és PdZn(111) felületeken a szénmonoxid kötési energiája a felületi ötvözetképződés esetén jelentősen csökken. Kimutatták, hogy metanol-víz elegyekben lokális mikroheterogenitások léteznek. Tanulmányozták a H-kötés topológiáját az oldószeranyagokban többféle módszerrel. Az eredményeket három közleményben publikálták.

Az „Arany-makrociklusok, arany-arany és arany-fém klaszterek előállítása és jellemzése különböző módszerekkel: Röntgendiffrakció, NMR, STM” c. OTKA-pályázat keretében előállított arany makrociklusos vegyület szolvátburkát, valamint az oldószer (nitrometán) szerkezetét elemezték a szupramolekuláris komplexek közötti térrészben. Az elemzés kimutatta, hogy a nitrometán-molekulák a komplex felszínén, a dipólusmomentummal párhuzamosan orientálódnak, majd a második szférától kezdődően fokozatosan a tiszta oldószerre jellemző szerkezeti vonásokat mutatnak. Az ellenionok a dipólusmomentum pozitív irányában dúsulnak. Az eredményeket egy folyóiratcikkben foglalták össze.

#### *Nemzetközi pályázatok*

COST P15 projekt keretében (téma címe: „Advanced paramagnetic resonance methods in molecular biophysics”) Cu(II)-komplexek impulzus ESR-vizsgálatait végezték el.

A „H-hidas komplexek fotofizikája” c. témában (együttműködő partner: Max F. Perutz Laboratories Department of Chemistry University of Vienna), egy osztrák-magyar TÉT-szerződés keretében elért eredményekre alapozva, közös ERA-NET Chemistry pályázatot nyújtottak be.

A „Polimer characterisation using electron capture dissociation and collision-induced dissociation multistage mass spectrometry” c. témában (együttműködő partner: Akzo Nobel Ag.), EU FP6-Marie Curie pályázat keretében a polimerek tömegspektrumának elméleti értékeléséhez szükséges módszereket dolgoztak ki, és azokat az ipari megrendelő számára fontos mintákon sikeresen alkalmazták.

A NAP VENEUS pályázat keretében lehetővé vált az önszerveződő aranykomplexek, tömény, vizes nátrium-hidroxid oldatok, valamint a víz-metanol és a víz-formamid elegyek mérése. Az eredményeket két cikkben publikálták.

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

1. Szabó-Plánka T, Gyurcsik B, Nagy NV, Rockenbauer A, Sípos R, Sima J, Melník M: Complexation of 5-fluorosalicylic acid with copper(II): A pH-potentiometric, UV-vis spectroscopic, and electron spin resonance study by the two-dimensional simulation of spectra, *Journal of Inorganic Biochemistry* 102(1): 101-109 (2008)
2. Tang L, Shi L, Bonneau C, Sun J, Yue H, Ojuva A, Lee BL, Kritikos M, Bell RG, Bacsik Z, Mink J, Zou X: A zeolite family with chiral and achiral structures built from the same building layer, *Nature Materials* 7(5): 381-385 (2008)
3. Costero AM, Colera M, Gavina P, Gil S, Kubinyi M, Pál K, Kállay M: Chiral cyclohexane based fluorescent chemosensors for enantiomeric discrimination of aspartate, *Tetrahedron* 64(14): 3217-3224 (2008)
4. Tárkányi G, Király P, Varga Sz, Vakulya B, Soós T: Edge-to-face CH/ $\pi$  aromatic interaction and molecular self-recognition in epi-cinchona-based bifunctional thiourea organocatalysis, *Chemistry-A European Journal* 14(20): 6078-6086 (2008)
5. Ujj V, Schindler J, Novák T, Czugler M, Fogassy E, Keglevich Gy: Coordinative resolution of 1-phenyl- and 1-naphthyl-3-methyl-3-phospholene 1-oxides with calcium hydrogen O,O '-dibenzoyl-(2R,3R)-tartrate or calcium hydrogen O,O '-di-p-toluyll-(2R,3R)-tartrate, *Tetrahedron-Asymmetry* 19(16): 1973-1977 (2008)
6. Ozohanics O, Krenyácz J, Ludányi K, Pollreisz F, Vékey K, Drahos L: GlycoMiner: a new software tool to elucidate glycopeptide composition, *Rapid Communications In Mass Spectrometry* 22: 3245-3254 (2008)
7. Rokob TA, Hamza A, Stirling A, Soós T, Pápai I: Turning frustration into bond activation: A theoretical mechanistic study on heterolytic hydrogen splitting by frustrated Lewis pairs, *Angewandte Chemie-International Edition* 47(13): 2435-2438 (2008)
8. Megyes T, Bálint Sz, Bakó I, Grósz T, Kótai L, Pálinkás G: Complete structural characterization of metallacyclic complexes in solution-phase using simultaneously X-ray diffraction and molecular dynamics simulation, *Journal of the American Chemical Society* 130(29): 9206-9207 (2008)
9. Tunyogi T, Deák A, Tárkányi G, Király P, Pálinkás G: Solvent-assisted spontaneous resolution of a 16-membered ring containing gold(I) showing short Au . . . Au aurophilic interaction and a figure-eight conformation, *Inorganic Chemistry* 47(6): 2049-2055 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	87	Ebből kutató <sup>2</sup> :	65
PhD, kandidátus:	20	MTA doktora:	15
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			71
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			71
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	1	idegen nyelven:	61
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	6
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	194,907	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	1892
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1474
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	4	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	44	posztterek száma <sup>10</sup> :	34
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			13
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát:	3
		PhD-t:	17
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			607
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			383,8 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	6	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	100 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			15
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	23,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	65,9 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5,6 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			20
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	22,6 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI KUTATÓINTÉZET

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

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

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

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

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

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

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

#### *Változócsillagok*

*Csillagok belső szerkezete, pulzációja (14 kutató, ebből 13 intézeti alkalmazott; becsült intézeti ráfordítás 140 millió Ft, ebből pályázati 18 millió Ft)*

RR Lyrae változók: Elvégezték az MW Lyr, nagy modulációs amplitúdójú Blazhko-csillag 2006-2007-ben a 60 cm-es távcsővel végzett kiterjedt többszínfotometriai méréseinek feldolgozását és elemzését. A fényváltozás Fourier-felbontása az ismert triplet szerkezeten túl kvintuplet és szeptuplet komponensek jelenlétét is mutatja. A fénygörbe minimum-felszállóág-maximum fázisaiban tapasztalható nagy reziduált valószínűleg sztochasztikus, kaotikus folyamatok magyarázzák.

Kifejlesztettek egy inverz fotometriai módszert (IPM) az alaplómódusú RR Lyrae csillagok pulzáció során bekövetkező luminozitás-, hőmérséklet-, sugárváltozásának csupán többszínfotometriai adatsorokból történő meghatározására. Az eljárás modulálatlan RRab csillagok esetében hasonló pontosságú eredményt ad, mint a radiális sebesség-mérések felhasználásával alkalmazott direkt Baade-Wesselink-módszerek. Az eljárás alkalmazásával először sikerült kimutatni, hogy milyen változások történnek egy Blazhko-csillag átlagos fizikai paramétereiben (luminozitás, hőmérséklet, sugár) a moduláció során.



Befejezték az M53 és M92 gömbhalmaz 2006. tavasza óta tartó, az intézet 60/90 cm-es Schmidt kamerájával végzett többszín-fotometriai észleléssorozatát. A fenti vizsgálatok eredményeképpen az M53-ban az eddig ismert 8 rövid periódusú ( $P < 0,1$  nap) csillagon kívül további 7 ilyen objektumot fedeztek fel, melyek többsége SX Phoenicis típusú változócsillag. Emellett 3 hosszú periódusú és számos vörös irreguláris csillagot találtak, valamint felvették 54 RR Lyrae típusú csillag fénygörbéjét, melyek között két új objektum van, három új esetben pedig kimutatták a fénygörbe modulációját.

2008 nyarán megkapták a CoRoT műhold első RR Lyrae észlelési adatait. A kapott idősorok vizsgálata során kimutatták, hogy az LRC01 területen talált 5 RR Lyrae csillagból 4 Blazhko-modulációt mutat, ezek közül az egyik esetében a moduláció amplitúdója az eddig talált legnagyobb. Meghatározták a csillagok frekvenciartalmait, és a fénygörbéket leíró matematikai modelleket. Az egyik Blazhko-modulációt mutató csillag Fourier-spektrumában magasrendű multipllett szerkezeteket azonosítottak.

A V372 Ser tenerifei és mátrai észleléseinek anyagát teljesen feldolgozták: Meghatározták a V372 Ser fundamentális paramétereit.

Meghatározták a BS~Com kétmódusú RR~Lyrae csillag fizikai paramétereit a megfigyelési adatok alapján. A számításokhoz pulzációs, fejlődési és csillag légkör modelleket használtak fel. Az utóbbiak alapján kiszámított effektív hőmérséklet és fémség jó egyezést mutatott a pulzációs és a fejlődési modellek alapján kapottakkal.

$\delta$  Cephei változók: Az EROS-2 égboltfelmérő program adatbázisát felhasználva a Magellán-felhők két-módusú cefeidáit tanulmányozták. 74 alaplómódusban és első felhangban pulzáló (F/O1) kétmódusú cefeidát találtak a Nagy Magellán-felhőben, míg a Kis Magellán-felhőben 41-et. Az első és második felhangban egyszerre pulzáló beat cefeidából (O1/O2) 173-ra, illetve 129-re bukkant a keresőalgoritmus.

Tovább folytatták az általuk összeállított, háromszáz klasszikus cefeidát tartalmazó, homogén adatbázis alapján a Tejútrendszerbeli cefeidák fénygörbéjéből és radiális sebesség-változásának fázisgörbéjéből meghatározható fenomenológiai paraméterek fémtartalom-függésének vizsgálatát. Megállapították, hogy a fotometriai amplitúdók hullámhossz-függésében is tapasztalható a légköri nehézelem-gyakoriságtól való függés.

A Siding Spring Observatóriumban felvett színeképek alapján hat déli cefeidáról kimutatták a spektroszkópiai kettős rendszerhez való tartozásukat.

$\delta$  Scuti változók: Publikálták a HD 49434 COROT célpont kiterjedt földi-bázisú fotometriai és spektroszkópiai kampányára alapozott eredményeket. A 0,2-1,7 ciklus/nap intervallumban 4, míg az 5-12 ciklus/nap intervallumban 6 frekvenciát azonosítottak. A kisfrekvenciák a  $\gamma$  Doradus csillagokra, míg a magasabb frekvenciájú módusok a  $\delta$  Scuti csillagokra jellemzőek (Paparó).

A HD 170699  $\delta$  Scuti típusú COROT jelöltnek a földi-bázisú megfigyelések alapján egy jól meghatározott 10,45 ciklus/nap-os frekvenciáját azonosították. A csillag többszörös periodicitása is valószínűsíthető, melyet remélhetőleg a COROT megfigyelések fognak feloldani.

Fehér törpék oszcillációja: A fehér törpe csillagok WET (Whole Earth Telescope) XCov25 kampányának keretében került sor a DBV típusú GD 358 megfigyelésére. A 436 órás adatsor alapján 27 független frekvenciát sikerült meghatározni, melyek közül több triplétt szerkezetű (összesen 10 módust lehetett azonosítani). A 24 évet átfogó korábbi észlelésekkel való összehasonlítás azt mutatja, hogy noha a frekvenciák többsége állandó, a multiplettek szerkezete komplex, nem azonosítható egyszerűen a rotációs felhasadással, mint azt korábban tették.

A PG 1159-035 csillagra a WET kampány keretében újabb 76 pulzációs frekvenciát azonosítottak. A korábbi ismert 122 azonosított módussal együtt az ismert gerjesztett módusok száma 198-ra emelkedett. A Nap után ezen a csillagon lehetett a legtöbb módust azonosítani.

Pulzáló változók modellezése: Vizsgálták, hogy az RR Lyrae modell pulzációban miként változik a megfigyelhető fizikai paraméterek egyes ciklusokra vett átlaga az amplitúdó függvényében. Erre a legegyszerűbb lehetőséget a határciklus kialakulása előtti tranzien vizsgálat ad. A fizikaihoz valóságosabb képet ad, ha kiterjedt modellsorozatot futtatnak eltérő turbulens viszkozitással. A két teszt lényegében azonos eredménnyel szolgált, így jó közelítéssel megadható az átlag értékek amplitúdó függése.

*Aktív jelenségek csillagok légkörében (4 kutató, ebből 3 intézeti alkalmazott; becsült intézeti ráfordítás 35 millió Ft, ebből pályázati 4 millió Ft)*

Folytatták az idő–frekvencia eloszlások alkalmazhatóságának tesztelését aktív csillagok fénygörbéjére. Kidolgoztak egy olyan eljárást, amely képes az eredmények statisztikai megbízhatóságát is vizsgálni. Az eljárással létrehozható egy nemlineáris idő–frekvencia átviteli függvény, ami jelzi a mintavételezés és zaj miatt létrejövő hamis komponensek relatív valószínűségét. Az eljárást bemutatták a napfoltciklus változásának adatsorain, és megerősítették korábbi eredményüket, miszerint a napaktivitás változása egy összetett, többskálájú folyamat.

Az LQ Hya H-alfa spektrumait felhasználva részletes vizsgálatot folytattak, melynek célja a kromoszféra feltérképezése volt. Sikerült egyértelmű kapcsolatot találni a korábban Dopplertechnikával optikai vonalakon rekonstruált fotoszférikus foltok és az UV spektrumvonalakból rekonstruált kromoszférikus fáklyamezők között.

Egy kampány (MUSICOS-1998) adatainak feldolgozásából elkészítették az EI Eri idősoros Doppler képeit, melyekből sikerült kimutatni a differenciális rotációt, mely nagyságát tekintve összhangban van az elmélettel.

A V405 And vörös törpékből álló kettőscsillagról készült többszín fotometriai mérések alapján pontosították a rendszerparamétereket, és analitikus modellekkel feltérképezték a felszíni mágneses aktivitás nyomait.

Méréseik szerint a TT Ari a nyolc évig tartó pozitív superhump, illetve az átmeneti állapot után jelenleg már egyre inkább a negatív superhump állapot jegyeit mutatja. QPO-k továbbra is jelen vannak – átlagos „periódusuk” 21,6 min. Ez a mérési eredményük ellentmond annak a korábbi elméleti várakozásnak, miszerint hosszú időskálán csökkennie kellene a QPO-k

átlagos periódusának. Összefoglalólag továbbra is azt kell mondani, hogy a TT Ari-ra vonatkozó megfigyelési eredmények nehezen egyeztethetők össze az elméleti várakozásokkal.

*Napaktivitás (6 kutató, ebből 6 intézeti alkalmazott; becsült intézeti ráfordítás 60 millió Ft, ebből pályázati 7 millió Ft)*

A korona kitörések (CME-k) során a táguló mágneses erővonalak talppontjai mentén a kiterjedő napkorona és az ennek következtében létrejövő sűrűség csökkenés a fényesség (emisszivitás) átmeneti csökkenéséhez vezet. Ezek az elsötétült területek 1-3 napon belül újra kifényesednek, amit korábban a CME által 'nyitottá' tett mágneses erővonalak lefűződésével értelmeztek. A Föld, sőt a Jupiter közelében a bolygóközi térben végzett *in situ* mérésekkel (Ulysses) elektronáramlást mutattak ki az Interplanetáris CME-ben, amely az ICME és a Nap között továbbra is fennálló mágneses kapcsolat bizonyítéka. Az ellentmondás feloldására egy új modellt javasoltak (esettanulmányokkal támasztván alá javaslatukat), miszerint a tranziens koronalyukak kifényesedése a 'nyitott' mágneses erővonalak diffúziójának következménye.

A Hinode napfizikai űrállomás EIS spektrométerének megfigyeléseit felhasználva tanulmányozták két aktív vidékben a plazmaáramlásokat. Mágneses extrapoláció segítségével kimutatták, hogy a 2007. február 20-án megfigyelt gyors plazma kiáramlás nagy-léptékű mágneses átkötődés eredményeként jött létre. Javasolták, hogy a kiáramló plazmanyaláb a napszél lassú komponensének egyik lehetséges forrása.

A 2007-ben publikált nagy visszhangot keltett új CME modellük kapcsán kimutatták, hogy több korábban nem értett CME jellemző értelmezhetővé válik ezzel a modellel, miszerint a CME-k fejlődésük során az alsó koronában mágnesesen átkötődnek a környezetükben levő mágneses terekkel.

A napfolt eloszlások és a torziós oszcilláció féltekék és ciklusok szerinti bontásban történő vizsgálatával megmutatták, hogy a napfoltok száma nagyobb a déli féltekén, mint az északin, s az északi félteke aktivitása időben megelőzi a déli félteke aktivitását. A déli félgömb napfolt eloszlása kb. annyival szélesebb az északi eloszlásnál, amennyivel a torziós sávok szélessége különbözik a két féltekén.

Megvizsgálták az 1993-98-as időszakra az irradiancia modelleket azokra a napokra, amikor csak egy vagy egy domináns méretű foltcsoport van. Azt kapták, hogy a különböző típusú foltcsoportok esetén a PSI különböző szorzója ad jó illesztést a mért TSI adatokra. A paraméter függ a foltcsoport kiterjedésétől, fejlődési állapotától, és a reziduálisok bizonyos típusoknál függést mutatnak a centrál meridiántól mért távolságától.

Megvizsgálták a területadatok hosszú távú szisztematikus változását, a greenwichi kislovodski, római, boulderi és debreceni adatok összehasonlításával. Kimutatták, hogy a különböző adatsorok összekalibrálásánál nem lehet figyelmen kívül hagyni az évtizedes vagy hosszabb időskálájú változásokat.

Elkészült 2000-2003-ra és 2007-re a DPD, az utóbbi teljes képi adatbázissal. Folytatták az archívum kiegészítését egész-korong mágneses észlelésekkel, valamint a beszkenelt napi fehér fényű egész-korong észlelésekkel az 1986-1988 évekre.

Elkészült 2007-re az SDD foltcsoportos bontásban. Közben tesztelték a programot, és keresték a CCD pixelhibákat, amelyek figyelembe vétele szükséges az adatbázis további javításához.

*Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája (4 kutató, ebből 4 intézeti alkalmazott; becsült intézeti ráfordítás 40 millió Ft, ebből pályázati 5 millió Ft)*

A Lynds 1622 molekulafelhő fősorozat előtti csillagainak alaposabb vizsgálata, valamint új információk a kettős és többszörös rendszerekről azt mutatják, hogy a felhő az OrionB távolságában van. A Lynds 1622 az OrionB óriás molekulafelhő irányában látszik, de sebessége mintegy 10 km/s-mal negatívabb. Ezért nem egyértelmű, hogy az Orion B-hez tartozik-e, vagy a látóirány mentén sokkal közelebb van hozzánk, az Orion–Eridanus buborék közelebbi határán. Megállapították, hogy a L1622-ben az Ori OB1B nagy tömegű csillagaiból eredő lökéshullámok indították el a csillagkeletkezést.

Az előző években összegyűjtött spektroszkópai és BVRI fotometriai adatok alapján a Cepheus flare különböző csillagképző felhőiben meghatározták 78 fősorozat előtti csillag alapvető tulajdonságait, valamint a 2MASS és Spitzer archívum elérhető adatai alapján akkréciós korongjaik tulajdonságait.

A Parsamian 21 nevű fiatal csillagról érveket hoztak fel az objektum FUor-természete mellett; megállapították, hogy a csillag nem része fiatal csillagok halmazának. A polarimetriás képeken jól megfigyelhető egy csillagkörüli burok, abban egy nyílás a pólusok irányában, továbbá egy éléről látott korong; a korong szokatlanul vékony (<80 Cs.E.), és a csillagtól 48–360 Cs.E. távolsáig követhető; összeállították az objektum SED-jét, mely jól reprodukálható egy korong és egy burok egyszerű modelljével; végül pedig megállapították az objektum helyét az evolúciós sémában, ami alapján a Parsamian 21 egy közepes korú objektumnak tűnik.

Az EX Lupi fiatal eruptív csillag 2008 januárjában az eddig látott legnagyobb kifényesedését produkálta, optikai fényessége mintegy 100-szorosára emelkedett. A kitöréskor jelentősen megváltozott a nyugalmihoz képest. A legjelentősebb alakzatok az erős emissziós fémvonalak és a H $\beta$  vonal. A mintegy 3 hetes megfigyelési időszak során az utóbbi időbeli változást is mutatott.

A kitörésben lévő EX Lupi rendszer részletes tanulmányozására összehangolt megfigyelési kampányt szerveztek. A Spitzer űrteleszkóp közép-infravörös spektruma kristályos szilikát részecskék jelenlétére utaló színképi jellegzetességeket mutatott 10  $\mu$ m körüli hullámhosszakon. Tudomásuk szerint ez az első közvetlen megfigyelés kristályok keletkezésére a világűrben. Továbbá megállapították, hogy mivel a forrás 50 évvel korábban már produkált egy hasonló erejű kitörést, az akkor minden bizonnyal keletkezett kristályok valamely, egyelőre nem azonosított keveredési mechanizmus során néhány év vagy évtized alatt eltűntek a korong felszínéről.

Az EX Lupit különleges objektumról. az irodalomból összegyűjtötték az elérhető fotometriai és spektroszkópai méréseket. Elkészítették a spektrális energiaeloszlást (SED) az optikai-infravörös hullámhosszakon, majd azt összehasonlították más fiatal csillagok SEDjével, végül

modellezték a RADMC radiatív transzfer kód segítségével. Azt találták, hogy az EX Lupi SED-je hasonló a normális T Tauri csillagokéhoz, azonban 7  $\mu\text{m}$  felett körülbelül 2,5-szer fényesebb a Taurus medián SED-nél.

*Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások (8 kutató, ebből 8 intézeti alkalmazott; becsült intézeti ráfordítás 60 millió Ft, ebből pályázati 8,5 millió Ft)*

A Naprendszer kis égitestei: Az ekliptikai üstökösök magja méretének és albedójának meghatározására a SEPPCoN (Survey of Ensemble Physical Properties of COmetary Nuclei) program során összesen 100 üstökösöt figyeltek meg, amelyből 7-et 4 Cs.E.-nél kisebb naptávolságban, 47-et 4–4,5 Cs.E. között, 20-at 4,5–5 Cs.E. között, 26-ot pedig 5 Cs.E.-nél nagyobb naptávolságban a megfigyelés pillanatában. A kumulatív méreteloszlási függvény (CSD) hullámos struktúrát mutat a nagyobb, kb. 3–5 km közötti rádiusznál. Az ekliptikai üstökösök CSD lefutása a korábbi, elsősorban a HST megfigyeléseken alapuló CSD lefutásával jól egyezik.

A 8P/Tuttle Oort-felhővel kapcsolatos üstökösöt a Hubble űrtávcső új Bolygókamerájával (PC2) 2007. december 10/11-én 12 HST keringésen, és mintegy 28 órán keresztül megfigyelték, amikor az üstökös a Naptól 1,25 Cs.E.-re és a Földtől 0,48 Cs.E.-re volt. A kapott fénygörbe egy, a legnagyobb főtengelyes nyomaték tengelye körül forgó, de összetett alakú testre utal, amelynek szinódikus tengely körüli forgási ideje 11,4 óra. A fénygörbe jól modellezhető egy-két különböző rádiuszú (1,2 km és 2,8 km), egymással érintkező gömbből összetett forgó testtel.

A 73P/Schwassmann–Wachmann 3 (73P/SW3) szétesett üstökös magjának több mint 60 lajstromba vett töredékét, fragmentumát sikerült kimutatni. A B és G komponens a HST ACS/WFC-vel 2006-ban végzett megfigyeléseinek előzetes eredményeit közzétették.

Az ESA Rosetta űrszondája első kisbolygó megközelítésének, a 2867 Steins fő aszteroid-övbéli kisbolygó közelében történő elrepülésének előkészítésére további vizsgálatokat végeztek. A fotometriai adatokat kibővítették a Steins kisbolygóról rendelkezésre álló földi teleszkópokkal megfigyelt fénygörbékkel, és a forgási periódust pontosították, illetve a forgástengely térbeli irányát megbecsülték.

Piszkéstetőn az 1 méteres RCC teleszkóppal többszínfotometriai megfigyelést készítettek 2008-ban több éjszakán keresztül (10258) 1940 AB fő aszteroid-övbéli kisbolygóról, arról a nevezetes objektumról, amelyet Kulin György a Budapest-svábhegyi csillagvizsgálóban fedezett fel és ami akkor üstökösnek látszott. A 2008-as piszkéstetői megfigyelések kiértékelésének előzetes eredményei nem mutatják az 1940 AB üstökös aktivitását.

Planetáris kutatások: Megkezdték a Mars déli sarkvidékén felfedezett, téli-tavaszi *sötét dűnefoltokból* (DDS) kiinduló, a rézsűkön megjelenő lefolyásos képződmények (DDS-seepage) azonosítását a Mars Reconnaissance Orbiter HiRISE (MRO) felvételein is. A Mars Express és Mars Global Surveyor (MGS) képeinél lényegesen nagyobb részletességgel, kb. 30 cm-es felbontással vizsgálhatták a lefolyásos-jelenséget. Három déli poláris kráterben a jelenség lefolyásának időbeli fázisait is sikerült felfedezni. Az új, 2008-as MRO felvételek tanulmányozásával a lefolyás-jelenséget a bolygó északi sarkvidéki területein, a helyi tavasz idején szintén sikerült megfigyelni.

Exobolygók kutatása: A beszámolási időszakban felfedezett extraszoláris bolygók: A HAT-P-6b egy „tipikus” forró Jupiter 1,06 Nap- tömeggel és 1,33 Jupiter- sugárral. Ez utóbbi az elméletileg számoltaknál valamivel nagyobb, de az eltérés nem jelentős. A bolygó periódusa 3,85 nap, a központi csillag pedig a fősorozattól enyhén elfejlődött F törpe. A HAT-P-7b rendszerében a központi csillag relatíve fémgazdag és magas hőmérsékletű F törpe, a fősorozattól kicsit elfejlődve. A bolygó igen közel kering a csillaghoz és emiatt természetesen a periódus is rövid ( $P=2,205$  nap). A bolygó tömege nagyobb, mint a Jupiteré.

Gamma kitörések: A többváltozós matematikai statisztika kanonikus korreláció analízisének a segítségével megvizsgálták, hogy van-e kapcsolat a Swift mesterséges hold által észlelt GRB-k gamma illetve Röntgen tartományban mért fizikai jellemzői között. A kapott eredmény alapján úgy tűnik, hogy szoros kapcsolat van a gamma és Röntgen tulajdonságok között. Meglepő eredmény, hogy a Röntgen színekéből kapható neutrális hidrogén (HI) látóirányba eső oszlopsűrűsége függ a gamma tartományban mért intenzitástól (Balázs).

Megmutatták, hogy a korábban a BATSE módszerrel mért GRB-k logaritmusos időtartamának az eloszlásához hasonlóan a Swift mesterséges hold méréseiben is jelen van a rövid és hosszú időtartamú GRB-k mellett egy harmadik, közepes időtartamú csoport, amelynek gamma tartományban mért spektruma lágyabb az előző kettőénél.

Elvégezték a Palomar P60 automata teleszkóppal 2007-folyamán készített GRB optikai tranziens (OT) észlelések többszínfotometriai elemzését.

Csillagászat története: A British Library-ban összegyűjtött anyagok segítségével tisztázták a „Nagy Holdátverés” (The Great Moon Hoax) részleteit, és ehhez kapcsolódó magyarországi fogadtatását, illetve hatását.

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

#### *Hazai kapcsolatok*

Együttműködtek a soproni GGKI-vel (felsőléggörri kutatások, planetológia); az ELTE Gyógyypedagógiai Főiskolai Karával (hallásvizsgálat) a Budapesti Műszaki Főiskolával (a fényszennyezés műszaki vonatkozásai); a Zselici Tájvédelmi Körzettel (fényszennyezés vizsgálata); valamint az MTA SZTAKI Analogikai és Neurális számítások Laboratóriumával (új hullámfront érzékelő fejlesztése).

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

ELTE-n: Előadás: Szeminárium a csillagközi anyag és a csillagkeletkezés témaköréből I-II, Akkréciós folyamatok csillagkörüli korongokban I, Asztrofizika, Csillagászat és kultúra, Csillagok Világa, A csillagkeletkezés alapjai, Obszervációs csillagászat, Csillagászat a fizika tanár továbbképzőn, Csillagaktivitás - aktív csillagok I-II., Asztrofizikai mérési módszerek, Asztrostatisztika I-II, Csillagrendszerek dinamikája I-II, Planetológia I-II, Mars-kutatás, Új eredmények az asztroszeizmológiában

Gyakorlat: Mérési gyakorlat IV. éves fizikus hallgatók számára.

DE-n: Előadás: Bevezetés az űrfizikába, A Nap és a csillagok fizikája.

SZTE-n: Előadás: Űrcsillagászat.

BME-n: Mérnöktovábbképzés –fényszennyezéssel kapcsolatos egyedi előadások

### *Nemzetközi kapcsolatok*

- Együtműködés az International Astronomical Union-nal (IBVS szerkesztés, IAU Comm. 27., Comm. 42 és Div. V. WWW szolgáltatások karbantartása)
- Részvétel nemzetközi szakbizottságokban (ASTRONET, SCOSTEP, SEAC)
- Együtműködés az amerikai Spitzer infravörös mesterséges holdra és az európai VLT teleszkópra benyújtandó pályázatok közös kidolgozásáról (MTA Csill. Kut., MPIA Heidelberg, STSI Baltimore, Stewart Obsz. Arizona)
- Részvétel az ESA Herschel űrtávcső előkészítő munkálataiban, hivatalos tagság a PACS műszer Instrument Control Centre-ben (ESA/PECS által támogatott projekt)
- Részvétel a COROT mesterséges hold előkészítő munkálataiban és az Additional Program-ban (ESA/PECS által támogatott projekt)
- GAIA asztrometriai űrmisszió változócsillag-munkacsoport; folyamatos részvétel a Nemzetközi Asztronautikai Akadémia munkájában.
- Részvétel a Kepler mesterséges hold Kepler Astro seismic Science Consortium-ában.
- Szoros együtműködés a Harvard Smithsonian Center for Astrophysics intézettel (HATNet adatanalízis)
- Közös projekt a Wise Observatory-val, Izrael (Wise Hungarian-made Automated Telescope)
- A DPD katalógushoz nemzetközi együtműködések keretében kapnak észleléseket a következő obszervatóriumokból: Kiszlovodszk (Oroszország), Kanzelhoehe (Ausztria), Mount Wilson (USA), Abastumani (Grúzia), Ebro (Spanyolország), Helwan (Egyiptom), Kijev, Lvov (Ukrajna), Kodaikanal (India), Ondrejov, Vassilicke Mezirici (Cseho.) és Tashkent (Üzbegisztán)
- Projektvezetés a „Production and cross-calibration of space-borne sunspot data” ESA-PECS projektben (együtműködés a stanfordi SOHO/MDI kutatócsoporttal a közös katalógus készítése céljából)
- Részvétel az ESO VLTI új generációs közép-infravörös interferométerének fejlesztésében (EU 6 FP OPTICON/JRA4 által támogatott projekt). Tagság az OPTICON European Interferometry Initiative tudományos szervezőbizottságában.
- Munkakapcsolat az AIP Potsdam-mal
- Francia-magyar együtműködés a Naprendszer kutatására az MTA-CNRS egyezmény keretében
- Japán-magyar együtműködés a csillagközi anyag kutatására (Nagoya Egyetem)
- Munkacsoport vezetés az EU FP7 SOTERIA (Solar Terrestrial Investigations and Archives, 11 európai ország 16 kutatóintézete) projektben.
- Együtműködés a Bolgár Akadémiával, a Virtual Observatory fejlesztésével kapcsolatban
- Részvétel az Euro-VO Data Centre Alliance-ban
- A 24“-es távcsőhöz kiegészítő méréseket kapnak (Michigan State Univ., AAVSO, ESO)
- Munkakapcsolat a Penn State Univ-vel gamma kitörések vizsgálatára
- Részvétel a Herschel ESA űrtávcső „TNOs are cool: A Survey of the Transneptunian Region” című Open Time Key Program-ja köré szerveződött konzorciumban

- Részvétel a CASSINI (Cepheid Atmospheres and Structures by Spectroscopy Interferometry and Numerical Investigation) projektben
- Részvétel az EAST (European Association for Solar Telescopes) konzorcium munkájában.
- Rendszeres megfigyelések a Teide Observatóriumban az EU FP6 Opticon programja támogatásával
- A Csillagászat 2009 (a csillagászat nemzetközi éve) magyarországi node-ja, valamint részvétel nemzetközi szakbizottságban („Dark Skies Awareness”)
- Szoros együttműködés és megfigyelések a Whole Earth Telescope network (WET) számára
- Együttműködés a Delaware Asteroseismic Research Center -rel
- Együttműködés a Saclay asztrofizikai intézettel (Franciaország) közös távcsőidő-igénylés kidolgozására a Herschel űrtávcsőre; valamint EU FP7 pályázat kriogenikus elektronikai alkatrészek közös kifejlesztésére ESA mesterséges holdak számára.
- Együttműködés az egyiptomi Hewlan observatóriummal a foltmentes napok, mint a következő ciklus indikátorairól.

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

Az ESA-val történt szerződés alapján 2008-ban három PECS pályázat futott az intézetben. Ezek közül kettő (COROT, Herschel) újonnan létrehozandó űreszközök előkészítésében, illetve programjának a lebonyolításában teszi lehetővé részvételüket. A harmadik pályázat keretében egy ESA adatbázis (SOHO/MIDI), illetve földi bázisú megfigyelések egybevetése a feladat. Mindhárom pályázat fontos kapcsolódást jelent élvonalbeli európai projektekhez.

Az EU FP7 keretében kezdődött 2008 végén a SOTEIRA program, amelyben az egyik munkacsoportot a debreceni observatórium vezetője irányítja. A program a Nap–Föld kapcsolatok vizsgálatát tűzte ki. A debreceni Napfizikai Observatórium tudásbázisán a Csillagászati Kutatóintézet fontos szereplője a projektnek. A SOTEIRA-ban való részvétel komoly lehetőség arra, hogy a Napfizikai Observatóriumban folyó munka ez eddigieknél is jobban betagozódjon az európai napfizikai kutatásokba. Az érdemi munka 2009-ben indul el.

Az EU 6-os keretprogramjában az OPTICON project keretében vesznek részt. Ennek során részt vesznek az ESO négy 8 m-es távcsövéből álló interferometriai rendszer kialakításában a MATISSE második generációs optikai interferometer fejlesztésében.

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

1. Dodson R, Fomalont EB, Wiik K, Horiuchi S, Hirabayashi H, Edwards PG, Murata Y, ..., Mosoni L, et al: The VSOP 5 GHz Active Galactic Nucleus Survey. V. Imaging Results for the Remaining 140 Sources, *Astroph. J. Supp.* 175, 314 (2008) (Impact factor: 7,898)
2. Frasca A, Kővári Zs, Strassmeier KG, Biazzo K: Chromospheric features of LQ Hya from H-alpha line profiles, *Astron. & Astroph* 481, 229 (2008) (Impact factor: 4,259)



3. Jorda L, Lamy PL, Faury, G, Weissman P, Barucci MA, Fornasier S, Lowry S, Tóth I, Kueppers M: Asteroid 2867 Steins. I. Photometric properties from OSIRIS/Rosetta and ground-based visible observations, *Astron. & Astroph.* 487, 1171-1178 (2008) (Impact factor: 4,259)
4. Jurcsik J, Sódor Á, Hurta Zs, Váradi M, Szeidl B, Smith HA, Henden A, Dékány I, Nagy I, Posztobányi K, Szing A, Vida K, Vityi N: An extensive photometric study of the Blazhko RR Lyrae star MW Lyr – I. Light-curve solution, *Monthly Notices RAS* 391, 164 (2008) (Impact factor: 5,249)
5. Kervella P, Mérand A, Szabados L, Bersier D, Fouqué P, Pompei E, Perrin G: The Long-Period Galactic Cepheid RS Puppis I. Geometrical Distance from the Propagation of Its Light Echoes, *Astron & Astroph* 480, 167-178 (2008) (Impact factor: 4,259)
6. Kóspál Á, Ábrahám P, Apai D, Ardila, DR, Grady, CA, Henning, Th, Juhász A, Miller, DW, Moór A: High-resolution polarimetry of Parsamian 21: revealing the structure of an edge-on FU Ori disc, *Monthly Notices RAS* 383, 1015 (2008) (Impact factor: 5,249)
7. Kun M, Balog Z, Mizuno, N, Kawamura, A, Gáspár A, Kenyon, SJ, Fukui, Y: Lynds 1622: a nearby star-forming cloud projected on Orion B?, *Monthly Notices RAS* 391, 84 (2008) (Impact factor: 5,249)
8. Muraközy J, Ludmány A: Cycle dependence of the longitudinal-latitude sunspot motion correlations, *Astron & Astroph* 486, 1003-1007 (2008) (Impact factor: 4,259)
9. Pál A, Bakos GÁ, Torres, G, Noyes, RW, Latham, DW, Kovács G, Marcy, GW, Fischer, DA, Butler, RP, Sasselov, DD et al: HAT-P-7b: An Extremely Hot Massive Planet Transiting a Bright Star in the Kepler Field, *Astroph J* 680, 1450 (2008) (Impact factor: 6,405)
10. Vavrek R, Balázs LG, Mészáros A, Horváth I, Bagoly Zs: Testing the randomness in the sky-distribution of gamma-ray bursts, *Monthly Notices RAS* 391, 1741 (2008) (Impact factor: 5,249)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	59	Ebből kutató <sup>2</sup> :	33
PhD, kandidátus:	9	MTA doktora:	11
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			8
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			128
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			103
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	28
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	3	idegen nyelven:	72
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	127,482	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	762
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			762
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	4
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	23	posztterek száma <sup>10</sup> :	10
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			19
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	10
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	12
			692
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			309 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	5	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	51 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			7
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	23 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			5
EU-forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,2 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	23,8 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

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

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

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

Az intézet tevékenységében 2008 folyamán az alaptevékenység gerincét alkotó reaktorbiztonsági kutatások mellett a perspektivikus energiatermelésre (negyedik generációs atomerőművek, kisebb mértékben fűzió) irányuló kutatások szerepe is jelentős volt. A Budapesti Kutatóreaktor biztonságos üzemeltetése, a kutatási lehetőségek folyamatos fejlesztése és így világszínvonalon tartása továbbra is jelentős feladata az intézetnek.

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

*Reaktorfizikai kutatások (4 kutató, 273,1 MFt ráfordítás, 64,9 MFt pályázat)*

A Generation IV reaktorok kutatásának jelentős része a hazai, NKTH által támogatott NAP és a HPLWR EU-6 projektek keretében folytatódott tovább. Ezek a projektek az elmúlt évben kimondottan egy típusal, a szuperkritikus vízzel hűtött reaktorokkal foglalkoztak. 2008-ban a zónatervezéshez és az üzemzavar-elemzésekhez szükséges, előző években kidolgozott csatolt reaktorfizikai-termohidraulikai számítógépes programok segítségével megtervezték a szuperkritikus hűtésű reaktorok egyik speciális típusának – a HPLWR (High Performance Light Water Reactor) – aktív zónáját, és elvégezték a reaktivitás üzemzavarok biztonsági elemzéseit. A kapott elemzési eredmények, valamint irodalmi adatok felhasználásával értékelték az adott reaktor-típus biztonságát. Kiszámították a HPLWR tartályfal sugárterhelését, ami az élettartam meghatározása szempontjából kulcsfontosságú. A számított HPLWR tartályfal sugárterhelés közel van a mai PWR reaktortartályok terheléséhez, és alatta van a 60 évre számított VVER-440 terhelésnek. A reaktivitás üzemzavarok biztonsági elemzéseit túlmutatnak az irodalomban találhatóakon abban, hogy a speciálisan vizsgált, bonyolult felépítésű HPLWR reaktor háromdimenziós folyamatait részletesen követik mind a teljesítménynek, mind a hűtőközeg forgalmának a tranziensek folyamán történő átrendeződése tekintetében.

Az uránkészletek jelenleginél lényegesen jobb kihasználása, valamint a nagyaktivitású hulladék minimalizálása céljából megvizsgáltak egy olyan fűtőelem-hasznosítási szenáriót, amiben a jelenlegi reaktorok kiegészített üzemanyagának reprocesszálása során elválasztott transzurán izotópokat, valamint a dúsítás során keletkező szegényített uránt a nagy mennyiségben rendelkezésre álló tóriummal együtt gyorsreaktorokban égetik ki. A

vizsgálatok eredményeit az OECD-nek mind a NEA „Working Party on Scientific Issues of the Reactor Systems” által szervezett – többek között az aktinidák transzmutációjával foglalkozó – „workshop” keretében ismertették.

Az utóbbi időben az erőművek egy jelentős részében végrehajtott teljesítménynövelés az adott rögzített kampányhossz mellett kedvezőtlenebb fűtőelem-felhasználáshoz vezet. Ezt általában a dúsitás növelésével kompenzálják, ami viszont gyakran problémához vezet a tároló és szállító eszközök szubkritikussága tekintetében. Az utóbbi probléma megoldására kiégő mérget tartalmazó fűtőelemeket alkalmaznak. A Paksi Atomerőműben alkalmazandó, kiégő mérget tartalmazó fűtőelemekből álló zónákra elvégezték a reaktivitás típusú üzemzavarok, valamint az üzemzavari védelmi működés nélküli események biztonsági elemzéseit. A kiégő mérget alkalmazása szükségessé teszi, hogy a tároló és szállító eszközök szubkritikussági elemzéseit ne csak a friss fűtőelemre, hanem kiégett állapotokra is elvégezzék, emiatt viszont a „kiégési hitel” („burnup credit”) metodológiát kell alkalmazni.

Az atomerőmű egyes üzemzavarai esetén jelentős mennyiségű radionuklid juthat a hermetikus térbe, aminek egy része a hermetikus tér szivárgása révén az erőmű helyiségeibe és végül a szabadba kerülhet. Az elmúlt években elkezdődött egy komplex modell fejlesztése a hermetikus térben végbemenő aktivitásterjedési folyamatok leírására.

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

*Termohidraulikai kutatások (1 kutató, 136,6 MFt ráfordítás, 11,6 MFt pályázat)*

A fűtőelem kazettában zajló keveredési folyamatok további kutatása keretében a sebességeloszlás mérések befejezése után áttértek a LIF (laser-induced fluorescence) metodika alkalmazásával a hőmérséklet eloszlások meghatározására különböző radiális teljesítmény eloszlások modellezésével. A kapott eredményeket felhasználva folytatódott a FLUENT kódra alapozott numerikus, számítási kazetta-modell validációja.

Az erőmű végleges biztonsági jelentésében (VBJ) hiányzó információként szerepelt a biztonsági hűtőrendszerek csővezetékének kondenzációból eredő vízütésre történő átvizsgálása. Az átvizsgálást elvégezték és a VBJ-be került információ szerint két kritikus csőszakasz kivételével, sehol sem mutatható ki a vízütés fellépésének veszélye.

A Paksi Atomerőműben a súlyos balesetek következményeinek csökkentésére kidolgozott eljárások között kiemelten szerepel a reaktortartály külső hűtése, amivel megakadályozható a megolvadt üzemanyag kikerülése a reaktoraknába. Mivel a kidolgozott koncepcióterv működőképessége kísérleti úton bizonyítható, ezért megkezdtek egy új kísérleti berendezés tervezését a folyamat modellezésére. A CERES berendezés műszaki terve elkészült, a kiviteli tervezés folyamatban van.

Számítógépi elemzésekkel megkezdtek az üzemviteli szabályzásokban meghatározott primerkörü/szekunderkörü hőmérséklet-változás sebességek okainak meghatározását, valamint ezen hőmérséklet-változás sebességi korlátok műszaki/tudományos megalapozását szilárdsági, törésmechanikai, termohidraulikai és egyéb kísérleti/mérési vizsgálatokkal.

Az új gadolíniumos fűtőelemek behozatali engedélyéhez számos biztonsági elemzés készült. Megvizsgálták a nagy primerköri hűtőközegvesztés több esetét, a gőzvezetési izoláló szelepek egyidejű bezárását, a primerköri szivattyúk elvesztésének limitáló eseteit. Ezeken túlmenően az ATHLET/KIKO-3D kódok segítségével csatolt termohidraulikai-neutronikai számítás végeztek a teljes keresztmetszetű gőzvezeték törés következményeinek vizsgálatára. Az eredmények azt mutatják, hogy az új fűtőelem hatása a biztonsági elemzések eredményeire elhanyagolható mértékű.

Az Országos Atomenergia Hivatal támogatásával két OECD projekthez kapcsolódva folyt a munka. A BEMUSE projekt keretében – amelynek célja a biztonsági elemzések bizonytalanságának számszerűsítése – az amerikai referencia erőműre 2007-ben elvégzett alapeset-számítás után meghatározták az érdemi bizonytalansággal terhelt paramétereket és azok bizonytalanságának valószínűségi eloszlását, majd azok ismeretében a kulcsparaméterek bizonytalansággal terhelt értékét. Az eredmények részét képezik a 2009 elején megjelenő OECD jelentésnek. A ROSA projektben végrehajtott egyik kísérlet a hideg üzemzavari hűtővíznek a primerkörben történő elkeveredését tanulmányozta. Az AEKI a FLUENT kód modelljeinek validációjára használta fel e kísérlet eredményeit, számítás végezett mind egyfázisú, mind kétfázisú primerköri állapotban az üzemzavari hűtővíz elkeveredésére vonatkozóan. Az eredmények szerint a kód kvalitatíve megfelelően írja le a folyamatot, de a befecskendezés környékén alul-, a hidegágban pedig túlbecsüli a hőmérsékleti keveredést.

A BEMUSE projekt tapasztalatainak felhasználásával megkezdődött a bizonytalanság-elemzéssel kiegészített legjobb becsléses módszer alkalmazása az üzemzavar elemzések hazai gyakorlatában. Első lépésként elkészült a maximális primerköri hűtőközeg veszteses eset alapszámítása, az ATHLET kód legújabb változatának felhasználásával.

#### *Fűtőelem és reaktoranyag kutatások (3 kutató, 168,4 MFt ráfordítás, 38,2 MFt pályázat)*

2008-ban új kísérleti berendezés létesült, amellyel vizsgálni lehet a hűtőközegvesztéses üzemzavarok során felfúvódott VVER típusú kazetták hűthetőségét. Hasonló berendezést eddig sehol nem hoztak létre hatszög elrendezésű fűtőelemkötegek vizsgálatára. A hazai berendezés egyik fontos sajátossága, hogy képes modellezni a felfúvódott szakaszban összegyűlő tabletta törmelék hatására kialakuló lokális teljesítménycsúcsot is. Az első kísérletsorozat bizonyította, hogy a VVER köteg hűthetősége nincs veszélyben üzemzavari körülmények között sem, de a felfúvódott kazetta lehűtése több időt igényel, mint a normál kazettáé.

A cirkónium felületen létrejövő oxidréteg felhasadásának következtében fokozott elridegedés léphet fel a fűtőelemek burkolatában. A felhasadás csak bizonyos körülmények között jön létre, ennek feltételeit magas hőmérsékletű kísérletekből határozták meg. Az oxidált mintadarabok post-test vizsgálata alapján sikerült meghatározni a felhasadást okozó anyagszerkezeti folyamatokat.

Anyagszerkezeti vizsgálatokat végeztek a paksi tisztítótartályból származó acéllemezzel. A metallográfiai elemzések és a minták hőkezelése alapján sikerült kimutatni, hogy a tartályban a hőmérséklet meghaladta az 1000 °C-ot.

A fűtőelemekben lejátszódó folyamatok numerikus modellezésére a FUROM és TRANSURANUS kódokat használták. A FUROM kód validációjához beszerezték az OECD NEA adatbankból az International Fuel Performance (IFPE) adatbázist, amely fűtőelemes kísérleti adatsorokat tartalmaz. Az adatbázis szisztematikus feldolgozására saját számítógépes rendszert hoztak létre. Sikeresen hajtották végre a haldeni reaktorban végzett VVER LOCA kísérlet utánszámítását.

A fűtőelemes szakemberek elemzéseket végeztek a Paksi Atomerőműben bevezetésre kerülő gadolíniumos fűtőelemekkel. A stacioner számításokhoz elsősorban a gadolíniumos modellekkel bővített FUROM kódot használták. Modelleket hoztak létre a paksi 2. blokkon tárolt sérült fűtőelemeket tartalmazó tokokból származó aktivitás kikerülés becslésére és feldolgozták az erőmű által átadott aktivitás-koncentráció adatokat.

*Operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése (2 kutató, 252,6 MFt ráfordítás, 11 MFt pályázat)*

A Paksi Atomerőmű blokkjain működő VERONA zónaellenőrző rendszer felújításának első fázisa a 2. blokkon fejeződött be, miután a 2008. évi főjavítás alatt a 2. blokkon is üzembe helyezték az új rendszert (az 1., 3. és 4. blokkon már az új rendszer működik). A próbaüzem sikeresen befejeződött, a rendszert üzemi rendszerré nyilvánították. Ezután a 2. blokkon 2008. december elején a reaktor teljesítménye 108%-ra nőtt. Jelenleg már a Paksi Atomerőmű összes blokkja emelt teljesítményen működik.

Üzembe helyezték a VERONA rendszer üzemeltetését és a szoftver módosítások tesztelését támogató VERONA-t konfigurációt is. Ez a rendszer nem rendelkezik adatgyűjtő berendezéssel, de a hálózaton át bármelyik blokkról képes átvenni és feldolgozni a mért adatokat. Ezzel a funkcióval a rendszer jól alkalmazható a jövőben szükségessé váló szoftver módosítások átfogó tesztelésére, minősítésére.

2008-ban folytatódott az a munka, amely a gadolínium kiégő mérget tartalmazó új kazetták kezelésére készíti fel a VERONA rendszer reaktorfizikai algoritmusait (ez a V6.20 VERONA verzióban fog megvalósulni). A munka során aktualizálták a projekt Minőségbiztosítási Terv dokumentumát, különös tekintettel az új reaktorfizikai algoritmusok validációs és verifikációs vizsgálataira. Elkészült az új reaktorfizikai feldolgozás számítástechnikai Rendszerterve, majd ennek alapján létrehozták a V6.20 reaktorfizikai szoftver első működő verzióját.

Befejeződött a Paksi Atomerőműben működő reaktor zajdiagnosztikai rendszerek felújítása. Az új, fejlett szolgáltatásokat nyújtó PAZAR zajdiagnosztikai adatgyűjtő rendszer az összes blokkon üzemszerűen működik. Az adatgyűjtő rész felújítását követően sor került az adatfeldolgozó rész modernizálására is, ezt a PAZAR-K kiértékelő rendszer valósítja meg.

Az Országos Atomenergia Hivatal Nukleáris Biztonsági Igazgatósága (OAH NBI) 2007-ben kezdte el a CERTA VITA információs rendszer teljes felújítását. A CERTA VITA az NBI Baleset-elhárítási Szervezetének Vészhelyzeti Intézkedési, Gyakorló és Elemző Központját (CERTA = Centre for Emergency Response, Training & Analysis) látja el a Paksi Atomerőmű négy blokkjára vonatkozó technológiai adatokkal. 2008-ban került sor a rekonstrukció fizikai megvalósítására: a 2007-ben elfogadott számítástechnikai Rendszerterv alapján megtörtént az új rendszer szoftver moduljainak kódolása, az új hardver- és

rendszer szoftver beszerzése és konfigurálása, a gyártóművi és helyszíni tesztek végrehajtása, az új rendszer próbaüzemének beindítása. Jelenleg az új rendszer párhuzamosan működik a régi CERTA VITA rendszerrel és több hónapos tesztelés után, 2009-ben válik üzemi rendszerre.

*Atomerőművi szimulációs kutatások (3 kutató, 139,7 MFt ráfordítás, 26,8 MFt pályázat)*

Elkészült egy módszer, amellyel megbecsülhető egy- és többkomponensű folyadékok folyadék-gőz stabilitási határa. A módszer tesztelése rács Boltzmann és molekuladinamikai szimulációkkal folyt, ezidáig vízre, argonra, hélium 3 és 4-re, valamint széndioxidra alkalmazták. A folyadék-gőz stabilitási határ gyakorlati fontosságát két esetben vizsgálták, a tervezett Európai Spallációs Forrás (ESS) higanytargetjének kavitációs problémáival, valamint a tervezett szuperkritikus vízzel hűtött reaktor (SCWR) vízkörében fellépő nyomáseséses balesetek leírásával.

Elkezdődött nagynyomású fémek és fémolvadékok extrém körülmények közötti vizsgálata is, ez leginkább a nagynyomású olvadáspontokat és a stabilitási hatásokat jelenti. Szuperkritikus folyadékok hőátadási problémáit tanulmányozva, felhívták a figyelmet arra, hogy az ún. pszeudokritikus hőmérséklet közelében, ahol több termofizikai paraméter (pl. sűrűség, fajhő stb.) jelentős változáson megy keresztül a hőmérséklet függvényében, nem csak ezen paraméterek hőmérsékletfüggése, hanem azok változása a nyomás függvényében is jelentős lehet. Mivel a korábban elvégzett sikertelen hőátadási számítások a paraméterek nyomásfüggését elhanyagolták, a fenti a megfigyelés a számítások kudarcának egy lehetséges magyarázatát adja. A paraméterek nyomás és hőmérsékletfüggését is figyelembe véve, hőátadási tényezőt származtattak szuperkritikus vízben zajló laminár áramlás esetére. A származtatott összefüggést összevetve a mérnöki gyakorlatban alkalmazott hőátadási korrelációkkal, megállapították, hogy igen szűk azon hőátadási problémák köre, melyek esetén a gyakorlatban általában alkalmazott összefüggések használhatók.

A NURESIM projekt keretein belül numerikus kísérleteket végeztek Taylor buborékokkal szubcsatorna szakaszokban. A szimulációk eredményeit sikerrel vetették össze korábbi mérési eredményekkel.

Sikeresen folyik a Paksi Atomerőmű Teljesléptékű Szimulátorának átalakítása. A feladat a teljesítmény növelés második lépéséhez kapcsolódik, a gadolíniumos fűtőelemek bevezetéséhez. A bevezetés során igen változatos zónakonfigurációk alakulhatnak ki, amelyekhez kapcsolódó szimulátoros oktatás már nem végezhető el a meglévő egyszerű modellel. Folytak a fejlesztések, amelyek segítségével a szimulátorba épül az AEKI-ben fejlesztett KIKO3D 3D neutronkinetikai kód, a RETINA kétfázisú termohidraulikai kód, és ehhez az egész szimulátort már átkerült egy sokkal nagyobb teljesítményű számítástechnikai környezetbe, a paksi oktatás – egyelőre a régi modellel – már az új rendszer felhasználásával folyik.

*Anyagtudományi kutatások (7 kutató, 370,3 MFt ráfordítás, 41,4 MFt pályázat)*

Megmérték a 3-metipiridin víz – nehézvíz elegy kisszögű neutronszorását az elegy deutérium-koncentrációja és a hőmérséklet függvényében. A mérések alapján megállapították, hogy az

oldott anyag molekulái közötti vonzó kölcsönhatás jelentősen felerősödik a víz – nehévíz elegy deutérium koncentrációjának növekedésével.

Számításokat végeztek szuperkritikus Ar-víz rendszerek termodinamikai viszonyaival kapcsolatban. Korróziós kísérletekben tanulmányozták a neutronokkal és protonokkal besugárzott Zr-1%Nb fűtőelem burkolat lokális korróziós hajlamát. A kísérletek célja a sugárkárosodás által okozott mikroszerkezeti változások hatásának tanulmányozása a korróziós tulajdonságokra.

Magas hőmérsékletű oxidációs kísérletekben tanulmányozták egyes szerkezeti anyagok (rozsdamentes acélok, titán ötvözet) korróziós viselkedését szuperkritikus nyomású és hőmérsékletű vízben. Az eredményekből következtettek arra, hogy a króm ötvöző hatása kedvezően befolyásolja a korróziós ellenállást.

Dinamikus neutron radiográfiai (DNR) vizsgálatokat végeztek a szuperkritikus állapotú víz megfigyelésére. A hűtőközegvesztéses balesetek szimulációjában megfigyelték a nyomáshullámok időbeli változását.

A BKR biztonságos üzemeltetését szolgáló vízkémiai program keretében neutron-aktivációs analitikai (INAA) és gamma-spektroszkópiai módszerrel vizsgálták a primer- és szekunderkörü hűtőközeg, valamint a különböző tároló medencék vízmintáit. Gamma-spektroszkópiai módszerrel vizsgálták primerkörü vízmintákban a szerkezeti anyagok kémiai korróziójából származó szennyezők aktivitás-koncentrációit.

Reaktorgáz mintákban, elsősorban a  $^{41}\text{Ar}$  és  $^{135}\text{Xe}$  nuklidok aktivitás-koncentrációit mérték a reaktor szellőzőrendszerének ellenőrzése, a normál üzemi viszonyokra jellemző kibocsátások monitorozása céljából.

Vízmintákban és ionkromatográfiás (IC) mérésekhez használt klorid standard mintákban elsősorban a klór, valamint az alumínium, kalcium, kálium, magnézium, mangán és nátrium koncentrációt határoztak meg INAA módszerrel. A kapott eredményeket összehasonlították a Paksi Atomerőmű Zrt. laboratóriumában végzett IC módszerrel kapott értékekkel.

A BNC (Budapest Neutron Centre) program keretében különböző eredetű (régészeti, biológiai) minták nyomelem analízisére került sor neutron aktivációs analitikai módszer segítségével. Együttműködtek a Bécsi Egyetemen (Táplálkozástudományi Intézet és Szervetlen Kémia Tanszék).

*Sugárvédelmi és környezetfizikai kutatások (12 kutató, 357,5 MFt ráfordítás, 58,6 MFt pályázat)*

A *Pille* tapasztalatai alapján az AEKI-ben kifejlesztett földi, kereskedelmi célú *PorTL* rendszert az *AEMI Atomenergia Mérnökiroda Kft. sikeresen hasznosítja*. Ugyanakkor az AEKI-ben 2008-ban is folytatódott a *PorTL* továbbfejlesztése; elkészült a kevert (gamma + neutron) sugárzási térben létrejövő albedo személyi dózis egyszerű mérésére alkalmas ún. ikerpatron dózismérő blokkjának prototípusa többféle változatban is.



Az elmúlt évben folytatódott a  $4\pi$  térszögben közel egyenletes érzékenységgel rendelkező háromtengelyű szilícium detektoros űrdozimetriai teleszkóp, a *TriTel* fejlesztése. A készülék az elnyelt dózis mellett a LET (lineáris energiaátadási tényező) és a sugárzási minőségi tényező meghatározására is alkalmas. A *TriTel* változatai a Nemzetközi Űrállomás európai modulján és orosz szegmensén fognak méréseket végezni.

Az ESA *Rosetta* űrszondájának leszálló egységére, mely 2014-ben éri el a Csurjumov-Geraszimenko üstököst, az AEKI közreműködésével két műszer is készült (a *ROMAP/SPM* plazma- és a *SESAME/DIM* por-detektor). 2008-ban is sor került a műszerek repülés alatti ellenőrzésére, a teszt-adatok kiértékelésére. A szondának a Steins kisbolygó melletti elrepülésekor a műszerekkel érdemi mérések történtek.

A 2007-ben szervezett Foton-M3 Biopan-6 bioszatellit kísérletben (Európai Űrkutatási Ügynökség, ESA) elvégezték a teljes körű sugárdozimetriai ellenőrzést. A cél az, hogy meghatározzák a kozmikus sugárzás mélységi eloszlását biológiai objektumokban, valamint a földi légkörben másodlagosan keletkező neutronok fluxusát és spektrumát. Az ESA a munkát oklevéllel díjazta.

A Nemzetközi Űrállomáson évente rendszeresen folyó kozmikus sugárzás vizsgálatokban 2008-ban is részt vettek a Japán Űrkutatási Ügynökség (JAXA) által szervezett Space-Ichiban-3 és az ESA megbízású Matroszka-2B programok keretében. Tovább folyt több korábbi űrdozimetriai mérés, valamint a kalibrációs célból besugarazott detektorok kiértékelése, az eredmények interpretálása és publikálása. Az AEKI-ben készült mérőegységek is beletartoznak azon eszközök sorába, melyekkel Magyarország hozzájárul a Nemzetközi Űrállomáson a nagy LET értékű neutron- és kozmikus sugárzás spektrumának és az integrális dózishoz, ezzel jelentősen növelve hazánk műszaki és tudományos hírnevét.

Az előző években kifejlesztett, a radon inhalációból származó, a tüdőre gyakorolt sugárterhelés és biológiai hatás jellemzésére kidolgozott, realisztikus légúti geometriát alkalmazó, háromdimenziós, numerikus áramlástan (CFD) alapú, tüdő dozimetriai modellt több ponton továbbfejlesztették. Az eddigiéknél lényegesen több hörgőt tartalmazó centrális légúti szegmenst állítottak elő. A fejlesztés másik iránya a mikrodozimetriai paramétereket és kockázatot számító modellegységek kibővítését jelentette. Ez lehetővé tette, hogy megfelelően széles tartományban tanulmányozzák a dózis-hatás összefüggést a lineáris-küszöbnélküli hipotézis érvényességének eldöntésére. Az új modell nemcsak sejtmagokban, hanem sejtekben is képes számolni a mikrodozimetriai és biológiai paraméterek értékeinek alakulását a dózis függvényében egy numerikus sejthám modell kidolgozásának köszönhetően. Ezen kívül a modellbe beépítették a bystander effektus (közelhatás) leírását is. Analitikus függvényeket dolgoztak ki a lokális terhelés és a sejtek szintjén bekövetkező különböző káros folyamatok (sejthalál, inicializáció, transzformáció, progresszió) leírására. Az eredmények alapján a fent említett hatások csak addig követnek közel lineáris összefüggést a terheléssel, amíg a többszörös találatok térbeli sűrűsége elhanyagolható.

Az Európai Spallációs Forrás egyik lehetséges helyszínére a laboratórium munkatársai végezték el az előzetes környezeti értékelést. A terület talajmechanikai adottságai számos hidrológiai és építőmérnöki kérdést vetnek fel, melyre a hatályos környezeti szabályozás tükrében javasoltak megoldásokat. A *European Science Forum for Large Infrastructure* a

környezeti elemzést teljesnek és alaposnak értékelte, környezeti alapon semmilyen akadályát nem látta a létesítmény debreceni telepítésének.

Az energetikai kutatások területén a villamosenergia-termelés teljes ciklusára végeztek környezeti külső költségszámításokat, amelyhez az energiahordozó kitermelése, szállítás és a hulladékkezelés során fellépő kibocsátásokat is figyelembe vették. Megállapították, hogy az erőmű üzemeltetése során keletkező környezeti kár a teljes üzemanyag-ciklusra vetítve lignittüzelés esetén 98%, szénttüzelés esetén 85%, míg földgáztüzelés és olajtüzelésű gázturbinák esetén 65%, atomerőmű esetén csupán 20% járulékot ad. A biomassza-tüzelés esetén a tüzelőanyag-ellátás környezeti kára jelentős, de tág határok között változik. Faapríték-tüzelés esetén csupán 17%-ot, szalmatüzelés esetén pedig mintegy 70%-ot képvisel a teljes üzemanyagciklus környezeti kárából.

Felépült a repülőtéri légszennyezettséget monitorozó rendszer, mely két egységből: egy fix, és egy mobil állomásból áll.

Aeroszol mintavételhez újrendszerű kaszkádimpaktort fejlesztettek ki, amely a totálreflexiós röntgenfluoreszcencia (TXRF) berendezéseknél szabványosított méretű mintatartókat használ, lehetővé téve az analitikai mérőeszközhöz való messzemenő illeszkedést. Az impaktor tárgylemezeibe referenciachipeket integráltak, mely belső standardként az aeroszolminta közvetlen kvantitatív mérését teszi lehetővé. Az új kaszkádimpaktor 9 fokozattal rendelkezik, lehetővé teszi a 100–250 nm-es mérettartományú részecskék mintavételezését is.

*A Budapesti Kutatóreaktor működésének fő eredményei (2 kutató, 528,3 MFt ráfordítás, 7,7 MFt pályázat)*

A „user program” keretében hazai és külföldi kutatók pályázhatnak a Budapest Kutatóreaktor nagyberendezésein történő mérési időkre. Kutatási pályázatot évente kétszer lehet benyújtani elektronikus úton, május 15-ig és október 15-ig. A beérkezett pályázatokat egy nemzetközi bírálóbizottság értékeli és rangsorolja. A pályázatok elbírálásának fő szempontjai a tudományos érték, az új kutatási téma, Ph.D vagy diplomamunka. Az évente beérkező rendkívül nagy mérési idő igény miatt csak a kiváló és jó pályázatok számára tud a Műszerközpont mérési kapacitást biztosítani.

A Budapest Műszerközpont aktívan részt vett az FP6 NMI3 –The Integrated Infrastructure Initiative for Neutron Scattering and Muon Spectroscopy – programban. Az NMI3/FP6 a közel 5000 fős európai neutron és muon kutatóközösséget támogató 4,5 éves projekt, amely 2008. június 30-án zárult. Az Európai Közösség által támogatott program fő célkitűzése, hogy hatékonyabbá tegye az európai neutron és muon berendezések használatát. A program záró konferenciáján bemutatott eredmények alapján, minden vállalt feladat maximális mértékben teljesült. A projekt több mint 900 kísérletet finanszírozott és több mint 1200 kutató részesült utazási támogatásban. Számos iskolát workshopot, szimpóziumot rendeztek. A Budapest Műszerközpont az NMI3 4,5 éves program keretében 82 projektet támogatott, amely során 493 reaktornapot bocsátott az európai kutatók rendelkezésére.

### *Az eredmények gazdasági-társadalmi haszna*

A kutatások és fejlesztések eredményei alapvetően két területen hasznosulnak. Az első terület a magyar atomerőmű, ahol a kutatási eredmények egy része közvetlenül hasznosul. A másik terület a magyar nukleáris hatóság (OAH), ahol az ellenőrzés, engedélyezés, felügyelet minőségének javulása az eredmények hasznosulási formája. Mindezen területeken azonban jelentős az eredmények nemzetközi hasznosulása is.

Az eredmények hasznosulásának új, valóban nagy jelentőségű területe lehet az új típusú energiatermelési módok kutatása, kifejlesztése. Ezen a területen döntő esemény a 2005-ben az NKTH által kiírt NAP pályázaton elnyert hároméves, majd újabb három évre meghosszabbított támogatás, ami lehetővé teszi, hogy az intézet bekapcsolódjon a negyedik generációs atomerőművek kifejlesztésére irányuló nemzetközi erőfeszítésbe. A NAP biztosítja az intézet szerény mértékű részvételét a távlatilag perspektívikus energiatermelési mód, a magfúzió alapuló energiatermelés kutatásában is.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének eredményeként ma Magyarország az EU új tagállamai közül egyedül rendelkezik olyan tudományos nagyberendezéssel, amit az EU működés részbeni finanszírozásával elismer.

Az űrelektronika, űrdozimetria területén elért eredmények a NASA, ESA révén hasznosulnak.

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

Az intézetben található az ELTE Természettudományi Kar Kémiai Intézetének és a Pannon Egyetem Vegyészmérnöki Karának kihelyezett laboratóriuma.

Az intézet kutatói mind az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán, mind pedig a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Természettudományi Karán aktívan részt vesznek mind az alapoktatásban mind pedig a posztgraduális képzésben. Az ELTE-n az AEKI kutatói a vegyészet, ezen belül a fizikai kémia oktatásában tevékenykednek, a BMGE-n pedig a nukleáris technika, ezen belül elsősorban a reaktorfizika területén.

Nemzetközi kapcsolataik fontos részét képezi az EU-projektekben való részvétel, kiterjedt nemzetközi kapcsolataik vannak számos kutatóintézettel és egyetemmel, elsősorban Európában, de a tengerentúlon is.

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

A hazai pályázatok közül a legfontosabb az intézet jövője szempontjából a NAP, amely újabb három évre biztosítja a perspektívikus energiatermelési mód (negyedik generációs atomerőművek, fúzió) kutatásának lehetőségét. Az NKFP- és GVOP-pályázatok fontos szerepet játszanak az intézet témaválasztékának bővítésében.

Az elnyert nemzetközi pályázatok mintegy fele az EU keretprogramjaiból származik és ezek jelentősége abban áll, hogy a korszerű atomenergetikához kapcsolódó nemzetközi kutatásokhoz biztosít kapcsolatot. A legnagyobb összegű EU-pályázat a kutatóreaktor európai hasznosítását teszi lehetővé. Jelentős a fúziós (EFDA) valamint az űrelektronikai pályázatok szerepe is.

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

1. Keresztúri A, Molnár A, Temesvári E, Korpás L: Statistical evaluation of the online core monitoring effectiveness for limiting the consequences of the fuel assembly mis-loading event, Nuclear Engineering and Design, 238, 1569-1576 (2008)
2. Balásházy I, Hofmann W, Farkas Á, Madas BG: Three-dimensional model for aerosol transport and deposition in expanding and contracting alveoli, Inhalation Toxicology 20, 611-621, (2008)
3. Imre AR, Mayer G, Házi G, Rozas R, Kraska T: Estimation of the liquid-vapor spinodal from interfacial properties obtained from molecular dynamics and lattice Boltzmann simulations, Journal of Chemical Physics, 128, 114708 IF: 3.166 (2008)
4. Végh J, Pócs I, Major Cs, Kálya Z, Horváth Cs, Parkó T, Ignits M: Core analysis at Paks NPP with a new generation of VERONA, Nuclear Engineering and Design 238, 1316-1331 (2008)
5. Barna F, Imre AR, Rosta L, Mezei F: Two-phase flow model for energetic proton beam induced pressure waves in mercury target systems in the planned European Spallation Source, The European Physical Journal B 66, 419-426 (2008)
6. Hózer Z, Győri Cs, Matus L, Horváth M: Ductile-to-brittle transition of oxidized Zircaloy-4 and E110 claddings, Journal of Nuclear Materials, 373, 415-423 (2008)
7. Auvinen A, Brilliant G, Davidovich N, Dickson R, Ducros G, Dutheillet Y, Giordano P, Kunstar M, Kärkelä T, Mladin M, Pontillon Y, Séropian C, Vér N: Progress on ruthenium release and transport under air ingress conditions, Nuclear Engineering and Design, 238 (12), 3418-3428 (2008)
8. Van Uffelen P, Győri C, Schubert A, van de Laar J, Hózer Z, Spykman G: Extending the application range of a fuel performance code from normal operating to design basis accident conditions, Journal of Nuclear Materials, 383 (1-2), 15 December, 137-143 (2008)
9. Lopez MA, Etherington G, Castellani CM, Franck D, Hurtgen C, Marsh J, Nosske, Breustedt B, Blanchardon E, András A, Bailey MR, Balásházy I, Battisti P, Bérard P, Birchall A, Broggio D, Challeton-de Vathaire C, Cruz-Suarez R, Doerfel H, Giussani A, Hodgson A, Koukoulidou V, Kramer GH, Le Guen B, Luciani A, Malatova I, Molokanov A, Moraleda M, Muikku M, Oeh U, Puncher M, Rahola T, Stradling N, Vrba T: International Dosimetry: Towards harmonization and coordination of research Rad. Prot. Dos. 131, 1, 28-33 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA KFKI Atomenergia Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	201	Ebből kutató <sup>2</sup> :	34
PhD, kandidátus:	24	MTA doktora:	4
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			8
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			131
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			119
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	36
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	40	idegen nyelven:	43
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	42,526	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	157
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			143
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	2
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	3	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	81	posztterek száma <sup>10</sup> :	21
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	1
		PhD-t:	4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			550
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			942 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	5	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	1199,3 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,3 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	98,1 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :3		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	34,5 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup>			19
EU-forrásból:	14	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	64 MFt
Egyéb:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	105 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			59
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1087,9 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			194,5 MFt

## KFKI RÉSZECESKE- ÉS MAGFIZIKAI KUTATÓINTÉZET

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

Telefon: 392-2512, Fax: 392-2598,

e-mail: sznagy@rmki.kfki.hu, honlap: www.rmki.kfki.hu

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

A Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet a beszámolási időszakban alapító okiratában rögzített feladatainak, valamint az MTA közfeladatainak ellátásából ráháruló teendőknek megfelelően eredményes kísérleti és elméleti tudományos alapkutató munkát végzett a részecskefizika, a magfizika, a plazmafizika, a hűtött atomok fizikája, az űrfizika, a nukleáris szilárdtestfizika, a nukleáris anyagtudomány és a fizika biológiai alkalmazásai területén. Fejlesztési tevékenységének területei: lézerfizika, nukleáris analitika, fúziós plazmadiagnosztika, űrtechnika, gyors adatfeldolgozás, spektroszkópia, speciális elektronikus, mechanikai és információ-technológiai eszközök, különböző operációs rendszerek alatt futó szoftverek. A Magyar Euratom Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálta a szabályozott magfúziós energiatermelés megvalósításához hozzájáruló magyar kutatás-fejlesztési tevékenységet. Működtette és fejlesztette nagyberendezéseit, az EG-2R gyorsítót, a hozzá kapcsolt NIK nehézion-implantert, a molekulanyaláb-epitaxia berendezést, a kutatást és a kapcsolatokat szolgáló GRID rendszerű és más nagykapacitású számítógépes hálózatait. Fenntartotta, működtette és fejlesztette a KFKI Telephely számítástechnikai hálózatát, fejlesztette az annak biztonságát növelő eszközöket, és ellátta a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Program regionális központi feladatait is.

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

#### *Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion fizika*

A nagyenergiájú részecske- és nehézion fizikai kísérleti kutatások döntő része továbbra is CERN együttműködésekben folyt. Nagy várakozás előzte meg az LHC gyorsító elindítását, amit a kísérleti üzemeltetés során fellépő technikai problémák 2009-re halasztottak, így az RMKI terveinek egy része is szükségszerűen módosult.

A CERN ALICE együttműködésében elkészítették a HMPID detektor on-line monitorozását és a kiolvasott adatok off-line analízisét biztosító szoftvereket, azokat az LHC gyorsító indulására folyamatosan aktualizálták. Az LHC próbaüzeme során részt vettek az ALICE detektorkomplexum beüzemelésében, valamint az HMPID kozmikus sugarakkal végzett tesztméréseiben, az adatok kiértékelésében. Megépítették a VHMPID („Nagyon Nagy Impulzusú Részecskéket Azonosító Detektorának”) trigger-egységeként működő TGEM alapú teszt-detektort, melyet a CERN-ben, 7 GeV/c impulzusú pion-nyalábjában sikeresen teszteltek. A CERN PS gyorsító kísérleti nyalábjában a VHMPID detektor gázegységének prototípusán is sikeres tesztméréseket végeztek. (8 FTE, 20 MFT RMKI, 13 MFT OTKA, 5 MFT NKTH)

Az LHC indulására felkészülve – a CMS kísérlet keretében – feldolgozták a szimulált 14 TeV tömegközépponti energiájú proton-proton ütközéseket, majd a 900 GeV-es és 10 TeV-es kölcsönhatások kiértékelése következett. A nyomkövető detektorok által mért energiavesztés becslését egy új, optimális súlyokat alkalmazó módszerrel végezték: a felbontás a beütések számának függvényében 5-25%-kal javult. (1 RMKI FTE, OTKA: 3,6 MFt, NKTH: 7MFt.)

Továbbfejlesztették a BUDAPEST Tier-2 GRID állomást a CMS és ALICE, valamint a HunGrid virtuális szervezet felhasználói számára, és az ezen besoroláshoz előírt teljesítményszintet 2008 végére mind a processzorkapacitás, mind a tárolókapacitás vonatkozásában sikerült lényegesen túlteljesíteni, általában 90% feletti megbízhatóság mellett.

Az RMKI kutatói lényeges szerepet vállaltak a CERN LHC TOTEM detektor adatgyűjtő (DAQ) és elsőszintű adatfeldolgozó rendszerének kiépítésében, az aldetektorok adatgyűjtő elektronikai rendszerének kifejlesztésében. (2 FTE, 6 MFT RMKI, 25 MFT OTKA, 6 MFT CERN)

Az NA49 kísérlet 17,3GeV nukleonpáronkénti tömegközépponti energián felvett proton-proton és ólom-ólom adatainak segítségével meghatározták a teljesen korrigált töltött pion, proton és kaon részecskék impulzuseloszlását merőlegesen kirepülő részecskék esetében. Ezeket az eredményeket a RHIC kísérletek 200 GeV nukleonpáronkénti tömegközépponti energián felvett adataival összevetve egy energiafüggési kép nyerhető az azonosított egyrészecske spektrumok tulajdonságairól. Az összehasonlításból egyértelműen kiderül, hogy az elméleti várakozásokkal szemben, az NA49 kísérlet adatai nem utalnak a RHIC energián felfedezett „pion hozamhiány” hirtelen megszűnésére, de arra igen, hogy a hozamhiány a RHIC energián jóval nagyobb, és folytonosan csökken az alacsonyabb ütközési energiák felé. (6 RMKI FTE; OTKA: 5 MFt.)

Az NA61/SHINE lengyel-magyar dominanciájú kísérlet első éve a korábbi NA49 átépítésének jegyében telt el. A teljesen magyar tervezésben és gyártásban, magyar software-rel korábban üzembe állított teljes adatgyűjtő (DAQ) rendszer megtízszerezte az adatátviteli sebességet és így megadta a lehetőséget, hogy elegendő nagy transzverzális impulzusú részecskét tartalmazó eseményt lehessen ésszerű idő alatt begyűjteni.

A részecskefizikai kutatások „hozadékaként” ma már, az RMKI-ban kifejlesztett, Magyarországon gyártott DDL (Detector Data Link) rendszert használja adatgyűjtésre a világ összes nagyméretű TPC kamrája: az ALICE az LHC-n, a STAR a RHIC-en és az NA61/SHINE az SPS gyorsítón.

A sokrészecske-keltés fenomenológiai vizsgálatában skálainvariáns sűrűség fluktuációk olyan leírását dolgozták ki, amely figyelembe veszi a nagy felbontásnál megjelenő ún. rapiditáshézag effektust. Megadták a közelítő ill. egzakt skálainvariancia tartományait. A fraktáldimenzió az inverz rapiditáshézag skálafüggvényének aszimptotikus hatványexponense (1 RMKI FTE).

Az OPAL kísérlet keretében lezárták a töltött Higgs-bozonok keresését 189 és 209GeV közötti LEP-energián. A töltött Higgs-bozon tömegére 76,6 GeV-es új alsó határt állapítottak meg 95%-os konfidencia mellett. Ezeket az eredményeket 360 kutató érte el (ebből 14 RMKI-s) 81,3 MF intézeti (ebből 40 MFt pályázati) forrás felhasználásával.

Az ASACUSA kísérletben az elektromágneses csapdát radialis kompresszióval kombinálva nagyszámú antiprotonot hűtöttek le, mely lehetővé teszi lassú antiprotonnyaláb kivezetését a csapdából. A lézerrendszer fejlesztésével és kétfoton-spektroszkópia alkalmazásával tovább pontosították az antiproton tömegének, töltésének és mágneses momentumának mérését a CERN antiproton-lassítójánál. A 2008-ban elért pontosság az antiproton és az elektron tömegének hányadosára  $2 \times 10^{-9}$ . (2 FTE, 4 MFt OTKA, 8 MFt RMKI, 8 MFt Univ. Tokyo)

A FOPI-kísérlet (GSI, Darmstadt) keretében bemérték a strange klaszterek vizsgálatára készített SILVIO detektort, a lambda-triggert, és a hozzá tartozó tracking programot. Meghatározták a HELITRON-detektor instabilitásait. Elméleti számításokat végeztek a neutrínó tömegének 0,2 eV pontosságú megmérését megcélzó KATRIN-kísérlet előspektrométerében lévő Penning kisülésekre vonatkozóan. Ezek a kisülések jelentősen megnövelhetik a spektrométerben kialakuló háttér nagyságát, különösen a neutrínó kísérlethez szükséges 18 kV potenciál elérése közelében. (1 FTE, 10 MFt DFG )

A Brookhaven Nemzeti Laboratórium RHIC gyorsítója mellett működő PHENIX kísérlet során elemezték az arany-arany ütközésekben keletkezett hadronok eloszlását, és ezen adatokból meghatározták a részecskesugarak és az ütközésben keletkezett nagy energiasűrűségű közeg kölcsönhatásának mértékét. A hadronok mellett elemezték a direkt fotonok és dileptonok mért eloszlásait is, amiből következtettek az ütközés legkorábbi állapotának tulajdonságaira. A kutatási programban a Debreceni Egyetemen és az ELTE Atomfizikai Tanszékkal együtt vesznek részt. (1 FTE, RMKI: 6 MFt, OTKA 7 MFt )

#### *Anyagtudomány kísérleti magfizikai módszerekkel*

Az anyagtudományi témacsoport feladata az volt, hogy elsősorban magfizikai módszerekkel kísérleti alapkutatásokat végezzen az anyagtudomány területén és fejlessze az ehhez szükséges kísérleti és elméleti háttérrel. A Magfizikai Főosztályon a Biofizikai Osztály illetve az MTA MFA feladataihoz is kapcsolódóan üzemeltették az 5 MeV-es EG-2R iongyorsítót. A NIK nehézion-implanteren sikeresen megkezdődött a Mössbauer-spektroszkópiái alkalmazások szempontjából fontos  $^{57}\text{Fe}$  ionok implantálása.

A molekulanyaláb-epitaxia (MBE) berendezés az év folyamán üzemszerűen működött; 43 növesztés során összesen 83 minta készült. Az MTA SZFKI-val, a dubnai EAI-val, az MTA IKI-vel, illetve a BME-vel együttműködve  $^{57}\text{Fe}/\text{Ag}$ ,  $^{57}\text{Fe}/\text{V}/\text{Cu}$ ,  $\text{Fe}/\text{Au}$  és granuláris  $\text{CoAg}$  rétegek készültek. Folytatták antiferromágnesesen csatolt  $^{57}\text{Fe}/\text{Cr}$  rendszerek, valamint,  $^{\text{nat}}\text{FePd}/^{57}\text{FePd}$  izotóp multirétegek előállítását. A 2008-ban használt források  $^{\text{nat}}\text{Fe}$ ,  $\text{Cr}$ ,  $\text{Ag}$ ,  $\text{Au}$ ,  $\text{Pd}$ ,  $^{57}\text{Fe}$ ,  $\text{Au}$ ,  $\text{Co}$ ,  $\text{Al}$ ,  $\text{V}$ ,  $\text{Cu}$  és  $\text{Pt}$  voltak.

Az itthoni kísérleti adottságokon túlmenően az egyes csoportok munkájuk jelentős részét nagy európai kutatási infrastruktúráknál, illetve partnereik lehetőségeit kihasználva végezték.

A spin-elektronikában fontos  $\text{MgO}(100)/\text{Fe}$  és  $\text{Fe}/\text{MgO}(100)$  határfelületek Mössbauer-spektroszkópiás vizsgálatával megállapították, hogy a  $\text{Fe}$  és  $\text{MgO}$  között nem alakul ki kémiai kötés, tehát a  $\text{Fe}$ -oxid képződése egyértelműen kizárható. Polírozott, illetve hasított  $\text{MgO}(100)$  felületen a  $\text{Fe}$ -réteg egymástól eltérő növekedését mutatták ki. Bebizonyították, hogy a rétegeképződés során az  $^{56}\text{Fe}$  és  $^{57}\text{Fe}$  diffúziós kicserélődése kizárható 300 K-en. (4 kutató, ebből 2 RMKI-s, 16,4 MFt intézeti forrás.)



Számos átmenetifém-vegyület elektronszerkezetét és spinállapotát karakterizálták nagyfelbontású röntgenspektroszkópiával. Legkiemelkedőbb eredményként röntgenemissziós spektroszkópiával kimérték a Föld köpenyének fő alkotója, a  $(\text{Mg,Fe})\text{SiO}_3$  perovszkit vasionjainak köpenybéli hőmérséklet- és nyomásviszonyok között lejátszódó spinállapot-változását. (15 kutató, ebből 1 RMKI-s, 11 MFt intézeti, ebből 3 MFt pályázati forrás.)

A titánt és ötvözeit – többek között a Ti–6Al–4V ötvözetet is – elterjedten használják orvosi implantátumok anyagaiként. Utóbbiról újabban kiderült, hogy vanádiumot, egy súlyos sejt-mérget bocsáthat ki magából, ezért a figyelem a vanádiummentes titánötvözetek kutatására irányul. Oxidrétegeket hoztak létre Ti–7Nb–6Al, Ti–13Nb–13Zr, és Ti–15Zr–4Nb súlysúlyalékú ötvözeteken különböző idejű, 750 °C-os, levegőn történő hőkezeléssel, majd a rétegvastagságukat, illetve összetételüket ionnyaláb-analitikával és pásztázó elektronmikroszkópiával határozták meg. Azonos oxidációs idő esetén a legvékonyabb oxidréteg Ti–7Nb–6Al ötvözetben képződik, ami egy  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -ban gazdag réteg kialakulásával magyarázható. A TiNbZr ötvözetben kialakuló oxidréteg főleg titánoxidból áll, amely kis mennyiségű Nb-ot, illetve Zr-t tartalmaz. Tisztázták a Nb szerepét az oxidációs folyamatokban: a Nb képes csökkenteni az oxigénvakanciák diffúzióját, így javítja az oxidációs ellenállást.

Mágneses vékonyrétegeken, elsősorban az általuk korábban kifejlesztett szinkrotron-Mössbauer-reflektometria, valamint a polarizált neutronreflektometria segítségével végzett kutatómunkájuk során hullámvezető szerkezetet fejlesztettek ki szupravezető vanádium és ferromágneses vas közelhatásainak és az ezzel kapcsolatos újszerű doménszerkezetek vizsgálatára. Az újszerű információátvitel egy lehetséges anyaga, a FePd ötvözetfilm ionimplantációja során meghatározták a szerkezetátalakulás energiatartását. Elméletileg megjósolták a diffúzió szórás reciprocitásváltozását. Elméletet és szimulációs programot fejlesztettek ki konverzióelektron-Mössbauer-spektrumok korrekt polarizációfüggő intenzitás számítására. Befejezték a Budapesti Kutatóreaktornál a polarizált neutronreflektométer építését. (18 kutató, ebből 8 RMKI-s, összesen 85,9 MFt intézeti, ebből 39,2 MFt pályázati forrás felhasználásával.)

A hélium szilíciumoxidban való viselkedését vizsgálva egy 1  $\mu\text{m}$  vastag poliszilíciummal elzárt oxidsziget közepébe héliumot implantálva megállapították, hogy míg az implantálás után a hélium mennyisége csak a besugárzott felületen mutatható ki, 9 hónap alatt a hélium szétterjed az egész oxidszigetbe, ami a hélium és a  $\text{SiO}_2$  közötti rendkívül gyenge kötődésre utal. (9 kutató, ebből 5 RMKI-s, 12,3 MFt intézeti, ebből 3 MFt pályázati forrás.)

Pozitron-élettartam-mérésekkel megállapították, hogy míg zeolitokban a Ps-képződés és befogódás dominál, (ami lehetőséget nyújthat termikus Ps előállítására is), a szén nanocsövekben a szabad annihiláción kívül csak felületi pozitroncsapdázódás lép fel. (6 kutató, ebből 2 RMKI-s, 16 MFt intézeti forrás.)

### *Elméleti fizika*

A múlt század 70-es éveitől kezdve a fekete lyukak 4-dimenziós Einstein-féle gravitációelmélettel való leírásában kulcsfontosságú szerepet játszik Hawking azon tétele, melynek állítása értelmében a fekete lyukak topológiája szükségképpen a 2-dimenziós gömbével megegyező. Később – Hawking érvelésének általánosítása révén – az 1990-es évek végén felfedezett, ún. topológiai fekete lyukak entrópiájára Gibbons és Woolgar egy a

topológiát jellemző számtól, a „genus”-tól függő alsó korlátot származtatott. Az elmúlt években jelentős sikereket értek el azok a próbálkozások, amelyek révén Hawking, Gibbons és Woolgar eredményeit a 4-nél magasabb dimenziós Einstein-elméletre általánosították. Egy új megközelítést alkalmazva az RMKI kutatóknak sikerült ezen általánosításoknak egy olyan egyszerű bizonyítását származtatniuk, mely tetszőleges dimenzióban és nemcsak az Einstein-féle elmélet korábban tekintett általánosítása esetén, hanem lényegében a gravitáció tetszőleges geometrizált elméleteiben lehetővé teszi a fekete lyukak topológiai jellemzésének lehetőségét. (3 FTE, 15 MFt RMKI, 4 MFt OTKA)

Távlati célként a relativitáselmélet Standard Modellbe való beillesztését is várjuk a nem kommutatív differenciálgeometria elméletétől, amely a matematika viszonylag új ága, és az operátor algebra és a differenciálgeometria ötvözeteként jött létre. Kvantumelméletek vizsgálatát nem kommutatív geometriájú (topológikus) tereken a renormálás alternatívájaként már Heisenberg is javasolta. Seiberg és Witten rámutattak, hogy húrelméletek is vezetnek „nemkommutatív” geometriákra. Egy nem kommutatív geometria (Hopf algebra vagy általánosabb) szimmetriájának leírására a „ciklikus kohomológia” elmélet alkalmas. A kutatók a para-(ko)ciklikus modellek olyan általános (kategória elméleti) konstrukcióját adták meg, amely a korábbról ismert (pl. Connes-Moscovici) példákat is magában foglalja. A konstrukciót alkalmazva ráadásul zökkenőmentesen adódik a bialgebroidok ciklikus kohomológia elmélete. Alkalmazásképpen meghatározták egy grupoid algebra Hochschild- és ciklikus homológia csoportjait.(2 FTE, 14 MFt RMKI, 2 MFt OTKA)

A modern kvantumelmélet többirányú kutatásának nemzetközileg jegyzett helye az intézet. A newtoni gravitáció és a kvantumelmélet kapcsolatára itt kidolgozott elmélet felhasználására, ellenőrzésére számos független publikáció született egyetlen év alatt. Példa a Genfi Egyetem foton-korrelációs kísérlete a 26 laboratóriumot egyesítő GAUGE űrkísérleti javaslat, az AURIGA gravitációshullám-detektorra tett javaslat, a Leideni Egyetem kvantumnanomechanikai fejlesztése. (1 RMKI kutató; 1 MFt OTKA, 1,3 MFt NKFP)

A szokásostól eltérő, ún. nem-extenzív termodinamika alapjául szolgáló entrópia-képletek és kanonikus energia-eloszlások kialakulását magyarázó új elvet tártak fel: Matematikai levezetéssel bebizonyították, hogy az absztrakt kompozíciós szabályok sokszoros ismétlésük során olyan aszimptotikus szabállyal lesznek egyenértékűek, amelyek asszociatívák és kommutatívák. Ez lehetővé teszi egy formális logaritmus explicit megalkotását, s ezzel az általános entrópia-sűrűség, valamint egyensúlyi energia-eloszlások meghatározását. Erre az általános keretre támaszkodva megmutatták, hogy a nagyenergiás részecskék hatványfarkú energia-eloszlásai (a kölcsönhatási energia relatív impulzusfüggése miatt) igen általános feltételek mellett is kialakulhatnak. A kapott eredmények a csatolt sztochasztikus folyamatok stacionárius eloszlásának Born-Oppenheimer közelítésével is összekapcsolhatók, ezért széles körben – pld. pénzügyi modellfolyamatokra is – alkalmazhatók. (2 FTE, 12 MFt RMKI, 4 MFt OTKA, 1 MFt TeT Alap)

#### *Plazmafizika és hűtött atomok fizikája*

A plazmafizikai kutatások továbbra is az eddigi három területre összpontosultak: a mágnesesen összetartott fúziós plazmák vizsgálata, a plazmákban intenzív lézerekkel keltett jelenségek tanulmányozása, valamint atomok csapdázása és atomi állapotok manipulálása lézerek segítségével. A kutatómunka mellett az elmúlt évben tovább erősödött az európai

nagyberendezéseken zajló fúziós technológiai kutatás-fejlesztés. A mágnesesen összetartott plazmák kutatásában a KFKI RMKI az EURATOM fúziós program magyarországi koordinátora. (20 kutató és 8 mérnök, 100 MFt RMKI, 221 MFt EURATOM, 25 MFt NKTH, 0,8 MFt NAÜ, 9,4 MFt OTKA).

A mágneses fúziós plazmafizikai kutatások keretében 2007 végén és 2008-ban a TEXTOR, a MAST és a JET tokamakokra felépítésre került lítium atomnyaláb diagnosztikával a következő tudományos eredmények születtek:

Meghatározták a plazma külső rétegében a sűrűségfluktuációt és a sűrűség eloszlását jó idő-és helyfelbontással, amely segítségével a plazma sűrűségének gyors változása, a poloidális áramlási sebessége és a poloidális korrelációs hossz is mérhetővé válik. Megfigyelték, hogy az ún. ELM instabilitást – legalábbis bizonyos esetekben – egy ideális MHD időskálán nemlineárisan növekvő hullám előzi meg.

A atomnyaláb diagnosztika sikere alapján a MAST kísérlet finanszírozza egy új kétdimenziós diagnosztika építését, amit – az optikai tervezés kivételével – az RMKI és két spin-off vállalkozása készít el. A JET tokamakra épített gyors kamerarendszerrel megfigyelték a pellet felhő nagysugár irányú gyors mozgását, valamint a pellet által triggerelt ELM instabilitás kezdetekor megjelenő erős helikális perturbációt. A TCV tokamakon részletes méréseket végeztek a plazmasugárzás intenzitás eloszlásának változásáról az ELM instabilitás alatt és azt tapasztalták, hogy a sugárzás a plazma belső oldali határán már az instabilitás kezdeti szakaszában növekedni kezd, ami a plazma-fal kölcsönhatás korai megjelenésére utal.

Befejeződött a több fúziós kísérleten is használni tervezett digitális kamera besugázási tesztelése és elkészült a Wendelstein-7X sztellarátor kísérletben a kamerát tartalmazó és mozgó mechanika mintapéldánya. Prágában a COMPASS tokamakra felszerelték, és itt sikeresen rögzítette a berendezés első plazmájának fényét.

A pelletek által lehűtött plazmában ún. elfutó (runaway) elektronok keletkezhetnek, amelyek károsíthatják a berendezést. Számításokat végeztek, hogy mely anyagok segítségével lehet hatásosan csökkenteni az elfutó elektronok számát.

A Wendelstein 7-AS sztellarátoron mért eredmények feldolgozása során sikerült kimutatni, hogy az úgynevezett HDH üzemmódban szisztematikus kapcsolat van a kvázi-koherens oszcillációk és a plazma szennyezőtartalma között: a kvázikoherens oszcilláció megjelenése eltávolítja a szennyezőket és így fontos komponense a HDH üzemmódnak.

Több más európai kutatóintézzel együttműködésben folyt négy ITER diagnosztikai eszköz koncepciójának kialakítása. Megtervezték ezek számos elemét, köztük a bolométer kamerákat, a plazmára néző első tükrök hűtését, mechanikai koncepcióját. Lényegesen előrehaladtak az ITER trícium-szaporító teszt kazetta beszerelésének, valamint egy jövőbeli demonstrációs erőmű divertor-tartománya karbantartási sémájának tervezésében. A mágneses fúziós területen az eredményeket 45 MFt EURATOM, 22 MFt NKTH és 14 MFt kiegészítő MTA támogatással érte el 23 kutató és mérnök. Ezekből a forrásokból finanszírozták 12 dolgozó teljes bérét (kb. 35 MFt), a Magyar EURATOM fúziós szövetség menedzsmentjét (kb. 5 MFt) és a JET tagdíjat (3 MFt). Az együttműködésekhez kb. 50 MFt EURATOM mobilitás támogatást kaptak.

A lézerplazma kutatási területen a 2008. évben jelentős feladatot adott a Szegedi Egyetem HILL laboratóriumában a felújított KrF lézer nyalábminőségének, illetve kontrasztjának javítása. 2008-ban továbbfejlesztették és publikálták a KrF lézerrel végzett gyors fúzió begyűjtési javaslatukat, amely csökkentheti a lézeres termonukleáris fúzióhoz szükséges összes lézerenergiát. A rövid, 1 pikoszekundumos impulzusú sémát a nemzetközi konferenciákon elhangzott előadásokon is élénk érdeklődés kísérte.

Az ultrarövid lézerimpulzusok előimpulzusoktól való megtisztításának legdivatosabb módszere a plazmatükör, amellyel infravörös lézereknél kiváló eredményeket értek el. Az RMKI kutatói előzetes kísérleteket végeztek 248 nm hullámhosszúságú nyalábbal. Azt tapasztalták, hogy ebben az esetben a reflexió a plazmaküszöb elérése után folyamatosan nő, és maximum ~25% érhető el  $10^{16}$  W/cm<sup>2</sup> esetén.

Az RMKI részt vett a garchingi MPQ-ban végzett „magas harmonikus” kísérletekben. Az MPQ 8fs-os impulzushosszúságú lézerét használva először sikerült 10fs-nál rövidebb impulzusokkal plazma-harmonikusokat kelteni. A kísérletek során sikerült megmutatni, hogy polarizációs eljárással lehetséges egyes attoszekundumos impulzusokat kelteni. *A lézerplazma kutatási eredményeket 2,5 millió forint EURATOM, 3,8 millió Ft OTKA és 2,8 millió Ft NAÜ támogatással érte el 2 kutató.*

A frekvencia-modulált lézerimpulzusok és soknívós atomok kölcsönhatásának tanulmányozása területén új módszert fejlesztettek ki koherens szuperpozíciós állapotok létrehozására optikailag sűrű anyagban. Megmutatták, hogy egyetlen frekvenciamodulált impulzussal a három metastabil állapot koherens szuperpozíciója állítható elő anélkül, hogy az atom számottevően gerjesztődne. Elméletileg megmutatták, hogy ugyanebben az atomi rendszerben a metastabil állapotok populációjába beírható és tárolható az optikai fázisinformáció anélkül, hogy az atomok gerjesztődjenek. Mivel az információ a metastabil állapotokba íródik be, az információátviteli idő nagyságrendekkel hosszabb lehet az ismert, indukált átlátszóságon alapuló módszereknél. Hatékony kísérleti módszereket fejlesztettek ki csapdázott rubídium atomok koherens mozgatására egymással szemben haladó rövid lézerimpulzusok alkalmazásával. *(7 kutató, 4,5 MFt OTKA-NKTH támogatás.)*

### *Űrfizika és űrtechnika*

Az intézet kutatói kísérleti és elméleti alapkutatást végeztek az űrfizika, valamint fejlesztési tevékenységet fejtettek ki az űrtechnika területén. Az Európai Űrügynökség még 2004-ben indította a Rosetta-Philae űrszonda párost a Churimov- Geraszimenko üstököshöz, s a tervek szerint 2014-ben a Philae leereszkedik az üstökösmag felszínére. A műszerek és az üstökös paramétereinek pontosítása a szonda tízéves missziója során a szoftver folyamatos finomítását igényli, melyben az intézet kutatói, mint a Philae központi számítógépének szoftver-fejlesztői, aktív résztvevők. A Steins asteroida melletti elhaladás előtt egy új szoftver változatát küldték fel a szondára, amely sikeresen irányította a Philae autonóm működését *(5 kutató, 20 MFt PECS).*

A Nemzetközi Űrállomásra kerülő Plazma Hullám Mérőrendszer három számítógépből álló adatgyűjtő szoftverének véglegesítését is az RMKI kutatói végezték. Befejezték a hő-vákuum tesztek a repülő példányon, melyet 2009 februárjában szállítottak ki Oroszországba, *(3 kutató, 8 MFt MŰI).*

Továbbfejlesztették a Szaturnusz E gyűrű modelljüket úgy, hogy a térbeni sűrűségeloszlás számítása során az Enceladus eredetű porszemcséknek a holdakba történő visszaütközési valószínűségeit súlyozó tényezőként használták fel. Ez a módszer az E gyűrű reálisabb leírását eredményezi a korábbi modelleknél alkalmazott, a visszaütközési élettartammal történő számoláshoz viszonyítva. A legfontosabb következmény az, hogy az E gyűrű térbeni kiterjedése jelentősen nagyobb, mint azt a korábbi modellek jósolták. Radiális irányban  $r=20 R_S$  ( $1 R_S=60330$  km) és vertikális irányban  $\pm 2 R_S$  adódott az E gyűrű maximális méretére. Jó egyezésben a földi Keck távcsöves és a Cassini mérések (CDA, RPWS) eredményeivel megmutatták azt is, hogy az Enceladusról elszökő jégzemcsék kezdeti 50-100 m/s sebessége következtében az E gyűrű radiális optikai mélység profilja az Enceladus pályasugarától kissé kifelé tolódik. (1 kutató, 5 Mft PECS).

A földkörüli plazma időbeli és háromdimenziós térbeli változásait vizsgáló négy Cluster szonda adatainak tudományos elemzésével két témakörben értek el új eredményeket. Folytatták a fejhullámhoz érkező érintőleges szakadási felület hatására kialakuló, forró plazmával töltött mágneses üregek (Hot Flow Anomaly) tulajdonságainak statisztikus vizsgálatát. Több évi mérési adat alapján megállapították, hogy a HFA jelenség napfoltminimum és napfoltmaximum idején egyaránt az átlagosnál nagyobb sebességű napszélben fordul elő. Ilyen sok adatot elemző tanulmány korábban még nem jelent meg a szakirodalomban. Részt vettek abban a munkában is, amely során hasonló mágneses üregeket észleltek a Cassini szonda elektron fluxus és mágneses tér mérései alapján a Szaturnusz fejhullámánál is. Több Cluster szonda méréseinek összehasonlítása alapján tovább tanulmányozták a mirror típusú mágneses fluktuációk amplitúdójának változását a földi fejhullám és a magnetopauza közötti tartományban. Az általuk számított növekedési ráta egy nagyságrenddel kisebb, mint a lineáris modellszámítások alapján korábban publikált értékek. Vizsgálták a bolygóközi és a lokális plazma paramétereknek a mirror típusú fluktuációkra gyakorolt hatását is, figyelembe véve a témakörben nemrég publikált szimulációs és adatelemzési eredményeket (4 kutató, 12 Mft PECS).

A Vénusz körüli pályán 2006. április óta méréseket végző Venus Express szonda ASPERA részecske-detektorának adatai alapján vizsgálták a bolygó plazmakörnyezetének tulajdonságait, a plazmatartományokat elválasztó határfelületek helyzetét. Első alkalommal észleltek vékony nyalábban áramló energikus semleges részecskéket a Vénusz árnyékában, valamint atomos oxigén ionizációja útján keletkezett fotoelektronokat a bolygó atmoszférájában (2 kutató, 8 Mft PECS).

### *Biofizika*

Az ICEA című pályázatuk keretében kibővítették a patkány tájékozódási képességét és annak tulajdonságait leíró elméletüket a hippokampo-kortikális visszacsatolás egy lehetséges megvalósításával. Megmutatták, hogy ezzel a bővítéssel a hippokampuszba érkező zajos vizuális inputok megfelelően képesek korrigálni az útintegrációból fakadó halmozódó hibát és stabilizálni a kortikális útintegrátort. A patkány helymeghatározását vizsgáló biológiai modelljüket nemzetközi partnereik is használják: közös munkájukban ez az elem robotok navigációs algoritmusának egy építőköve. Kidolgoztak egy, a szemcses sejtek morfológiáját is figyelembe vevő modellt, mellyel megmutatták, hogy egyrészt megfelelő izoláció esetén a dendritágak egymástól függetlenül tanulnak, másrészt a független helymezőkért a dendritágakban lokálisan megjelenő, dendritikus tüzelések lehetnek felelősek.

Analitikus számításokkal megmutatták, hogy az entorhinális agykérgi területen található ún. Grid-sejtek háromszögrácsokba szerveződött érzékenységi mezeje a metrikus tér optimális és skálázható reprezentációját valósítja meg, amely maximálisan kihasználja az euklideszi tér szimmetriáit. Az elmélet alapján felállított neuronhálózati modell szimulációjával megmutatták, hogy a metrikát kódoló, feltételezett távolság-sejtek viselkedése összhangban van az agykéreg gyrus dentatus régiójában található sejtek kísérletileg észlelt viselkedésével.

A skizofrén betegek megváltozott asszociatív memória teljesítményére irányuló vizsgálataik során, feltételezve, hogy az emléknymok a hippocampusban tárolódnak, míg a prefrontális kéreg a tanulási folyamat irányításában játszik szerepet, megmutatták, hogy a betegekben mérhető gyengébb teljesítményt a két terület közötti interakció elromlása okozhatja. A striatum sejt szintű és kishálózat szintű működésének analízisével megmutatták, hogy a dopamin alternálni képes egyes részrendszereket az oszcilláló és a stabil fixpont megoldások között a D1 és D2 receptorokon keresztül. (3 RMKIs kutató, 16,3 MFt RMKI költségvetési és 9,8 MFt EU FP6 pályázati keret.)

Az EuResist című pályázatuk keretében megalkottak egy döntéstámogató rendszert, amely segíti a HIV fertőzött betegek gyógyszeres kezelését. A rendszer webes felületen keresztül érhető el. ([http://www.euresist.org/contenuti/doc/D2\\_1.pdf](http://www.euresist.org/contenuti/doc/D2_1.pdf)). A rendszer olyan gyógyszer-kombinációkat javasol, amelyek figyelembe veszik a beteg adatait és a beteget megtámadó vírusokról meglevő adatokat (4 RMKIs kutató, 15,8 MFt RMKI, 10,1 MFt EU FP6).

PIXE-PAGE módszerük mikronyaláb változatával kimutatták, hogy a mikronyaláb mérésekben szokatlanul nagy, 1-2 nA protonáram használata esetén sem észlelhető a gélelektroforetogram mintákon roncsolódás. Ilyen mérési körülmények között egy izolált sávban körülbelül 3 µg citokróm enzim már detektálható Fe tartalmának mérésével. Ez az eredmény azt jelenti, hogy még azt is figyelembe véve, hogy 100 µg összfehérje mennyiségnél több nem futtatható gélen és egy keverékben akár 10 – 50 féle fehérje is lehet, melyek közül csak néhány tartalmaz fémionokat is, valós esély van arra, hogy ezeket a fémtartalmú enzimeket ki lehessen mutatni a mikroPIXE-PAGE eljárással (3 kutató, 18 MFt RMKI, 1 MFt NAÜ forrás).

#### *Informatika, e-tudomány (e-science)*

A KFKI RMKI Számítógép Hálózati Központ (SZHK) munkatársai az MTA KFKI Telephely 5 MTA intézet számára szolgáltatást nyújtó központi szerverpark előző évi felújítását követően elvégezték a KFKI RMKI fő szerverei funkcióinak és szolgáltatásainak az új generációs szerverekre való migrálását.

A levelezés (SMTP) IPv6-os támogatásának kiépítésével a GVOP – 2004 – 3.1.1 Campus6 pályázata keretében most már a központi szerverpark minden szolgáltatását elérhetővé tették. Ezt a nehéz feladatot az SZHK munkatársai a telephelyi tudományos munka folyamatos kiszolgálása mellett, annak a lehető legkisebb megzavarásával oldották meg.

A Beszéd- és Rehabilitáció-technológiai Osztály (BRTO) csökkent munkaképességű, elsősorban vak és gyengénlátó emberek számítógép-használatát segítő eszközöket fejleszt. A Mobil SegítőTárs (MOST) fejlesztését a GVOP - 2004 - 3.1.1 MOST2 projekt – melynek konzorcium-koordinátora a veszprémi Pannon Egyetem – feltételei szerint legalább 2013-ig

kell folytatni. 2008-ban két további telefonos PDA-ra adaptálták a MOST rendszert. Elkészült egy sakk-program, tudományos kalkulátor és a meglévő alkalmazások számos finomítása. Egyelőre PC-alapon elkezdtek egy GPS navigációs alkalmazást fejleszteni a Nav N Go Kft-vel együttműködve. A Nemzetközi Braille kottairás témában munkatársaik szakértőként kapcsolatot tartottak a magyarországi Braille Music Editor felhasználóival is.

### *Egyéb bemutatható eredmények*

A 2008-as Filmszemlén bemutatták sorrendben a hatodik, az RMKI munkatársainak közreműködésével készült „A láthatatlan Naprendszer” című tudományos ismeretterjesztő filmet.

Az LHC gyorsító indítását kísérő nagy médiaérdeklődést kielégítendő, a közvélemény tájékoztatása és az események értelmezése érdekében az RMKI vezető kutatói jelentős közszereplést (közszolgálati és kereskedelmi rádió és TV csatornák, internetes fórumok, ismeretterjesztő előadások) vállaltak. A kedvező visszhang jelezte, hogy ezzel a tevékenységgel egyrészt a tudományos célkitűzések közérthetőbbé váltak, másrészt az Intézet és a hazai természettudományos kutatás ismertsége és elismertsége is érezhetően nőtt.

Sorozatban nyolcadszor rendezték meg a „Zimányi Winter School on Heavy Ion Physics” nehézionfizikai iskolát, mely mintegy 50 résztvevővel és 40 előadással a kutatási terület fontos rendezvénye.

Ismét – immár ötödször – megrendezték, 20 európai ország 70 kutatóintézetével és egyetemével közösen, középiskolás diákok számára az egész napos videokonferenciás „Részecskefizikai mesterkurzust”, melyen évente 10-10 budapesti középiskola mintegy két tucat diákja vesz részt

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

Az RMKI számos MTA kutatóintézettel tart fenn aktív szakmai kapcsolatot, a legszorosabbakat a KFKI telephelyén található intézetekkel, melyekkel formális összefogást is jelent az, hogy tagja az SZFKI, AEKI, MFA és RMKI alkotta KFKI Condensed Matter Research Center-nek és a Budapesti Neutron Központnak (BNC). A hagyományosan erős ATOMKI kapcsolat ebben az évben több ponton is tovább erősödött. A hazai ionnyaláb-fizikai berendezések hatékonyabb működtetése, kihasználása és fejlesztése céljából a két intézet közös kutatási infrastruktúra-hálózatot hozott létre Magyar ionnyaláb-fizikai platform (Hungarian Ion-beam Physics Platform, HIPP, <http://hipp.atomki.hu/>) néven. A European Centre for Theoretical Studies in Nuclear Physics and Related Areas (ECT), Trento, Olaszország, tevékenységében való együttes részvétel céljából létrehozták az „ECT-Hungary” konzorciumot. A HIPP-et az ATOMKI, az ECT-Hungary-t az RMKI képviseli. Hasonló együttműködés van kialakulóban az RMKI és az ATOMKI között az ESS leendő megvalósításával kapcsolatban is. Fontosak az RMKI munkakapcsolatai a KK, a SZTAKI, a Konkoly Thege Miklós Csillagászati KI és az SZBK kutatóival is. Az RMKI SzHK az NIIF program regionális központja, az SzHK két munkatársa az NIIF egy-egy bizottságának tagja.

Az RMKI továbbra is nagy fontosságot tulajdonít az egyetemekhez fűződő szoros kapcsolatoknak. Ebben az évben 33 munkatársa tartott kötelező és speciális előadásokat,

vezetett gyakorlatokat az ELTE, a BME, a Pécsi Tudományegyetem, a Szegedi Tudományegyetem, a Debreceni Egyetem, a Szent István Egyetem, a Közép-európai Egyetem és a Budapest School of Cognitive Sciences tanszékein. A felsorolt egyetemekkel érdemi kutatási együttműködés is folyt. Az RMKI munkatársai több külföldi felsőoktatási intézményben is tartottak előadásokat. Az ELTE, a BME és a Szegedi Egyetem érdekelt Doktori Iskoláival aláírt együttműködési megállapodások alapján az RMKI számos vezető kutatója alapító, illetve törzstagja és oktatója ezeknek az iskoláknak. Munkatársai részt vettek a „Nanoszerkezetek alakítása és minősítése foton-, ionnyaláb- és magfizikai módszerekkel” című ERASMUS iskola szervezésében (2008. május, Smolenice, Szlovákia) és az iskolát akkreditálták az ELTE Fizika Doktori Iskolájába. Az intézet rendszeresen fogadja az ELTE fizikus és biofizikus hallgatóit a tanrendben előírt emelt szintű laboratóriumi gyakorlatok végzésére, témákat és témavezetést biztosít tudományos diákköri dolgozatok és 16 egyetemi szakdolgozat készítéséhez. Jelenleg 26 PhD értekezés készül RMKI-s témavezető irányításával, 5 eredményes PhD -védés volt.

Az RMKI-ban szinte valamennyi kutatás nemzetközi keretekben folyik, a legfontosabb szálak a CERN-hez, az ESA-hoz és az EURATOM-hoz kapcsolódnak, de eredményes az együttműködés számos egyéb nemzetközi és nemzeti kutatóintézménnyel és egyetemmel is. Az RMKI 2008 során teljes jogú tagságot nyert a CERN LHC TOTEM kísérletében. Egyre fontosabb szerepet kap a külföldi, elsősorban európai nagyberendezések (szinkrotronok, iongyorsítók, neutronforrások, tokamakok, sztellarátorok) mellett, vagy azok létrehozására irányuló (pl. ITER) kutatás. Ezen túlmenően azonban az eredményekben nagy szerepe volt az MTA bilaterális kapcsolatain alapuló megállapodásoknak, a TÉT együttműködéseknek, valamint két MTA–EAI (Dubna) projektnek, melyek megújítása a partnerek közös érdeke. 2008 során az RMKI több hosszú távú együttműködés kialakítására irányuló „Letter of Intent” keretmegállapodást írt alá amerikai, olasz és vietnami intézetekkel.

Az együttműködő partnerek tételes felsorolása e beszámoló kereteibe nem fér bele, pl. az űrfizikában mintegy 35, az anyagtudományi kutatásokban 30 külföldi intézettel folynak közös kutatások, részecskefizikában százat is meghaladó intézetről van szó, közöttük mindenütt a szakterület legnevesebb intézményei szerepelnek.

A részecskefizikusok és nagyenergiás magfizikusok a CERN-nél végzett mérések adatainak feldolgozásában és az új LHC részecskegyorsító CMS, ALICE és TOTEM kísérleteinek felépítésében és új SPS kísérletek előkészítésében is részt vesznek. Az RMKI kutatói a CERN-ben nemcsak a „mamut”-kísérletekben vesznek részt, hanem kisebb mérésekben is kezdeményező szerepet játszanak, így pl. a NA61/SHINE kísérlet révén a nemzetközileg is magasan értékelt elméleti nehézion-fizikai kutatások hazai vezetésű kísérleti kutatásokkal is kiegészülnek.

Az RMKI koordinálja a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium (USA) Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjénél (RHIC) az ELTE és a Debreceni Egyetem részvételével működő PHENIX-MAGYARORSZÁG kísérleti együttműködést.

Az RMKI az Euratom Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálja a magyar EURATOM fúziós programot, melyben így számos magyar intézmény (KFKI AEKI, Széchenyi Egyetem, ATOMKI, BME, ELTE, Dunaújvárosi Főiskola) az RMKI közvetítésével vesz részt. E szerepből adódóan kutatói számos nemzetközi bizottságban tevékenykednek. Mivel Magyarországon működő fúziós berendezés már nincs, ezért a kutatóknak aktív kapcsolatot



kell tartaniuk a külföldi berendezéseket üzemeltető és építő intézetekkel is, valamint részt kell venniük a különböző európai munkacsoportok és különböző európai bizottságok munkájában, kettőben (EFDA-STAC és EURATOM STC) alelnöki minőségben is. Az európai közös tokamakon (JET) végzett munkában a lítium nyaláb diagnosztika felelőse a magyar csoport, melynek kutatói bekapcsolódtak a világ leendő első fúziós reaktora, az ITER tervezési munkáiba is, ahol – az eddigi munka elismeréseként – az RMKI részt vett négy európai ITER diagnosztika konzorcium tárgyalásain. A tervek szerint magyar kutatók ezen projektek megvalósításában 10-30% közötti részt fognak vállalni. Az RMKI egyik mérnöke az európai konzorcium diagnosztika és integrációs területének projektvezetője. Az ITER előkészítésében folytatott munka elismerése, hogy az „International Tokamak Physics Activity” (az ITER tudományos háttérszervezete) diagnosztika munkacsoportjában az egyik európai képviselőnek az RMKI munkatársát választották. Fontos része a nemzetközi kapcsolatok építésének, hogy a 2010-ben megrendezendő 31. ECLIM konferencia helyszínéül Magyarországot választották, a szervező bizottság elnöke az RMKI munkatársa.

Az RMKI működteti a Cluster Magyar Adatközpontot, amely pálya- és egyéb kiegészítő adatokat szolgáltat az ESA (Európai Űrügynökség) négy, azonos műszerezettségű Cluster holdjának tudományos adatrendszerébe. A biofizika (számítógépes agytudomány) területén eredményes nemzetközi pályázatok alapján folytatódik az aktív, professzor- és hallgatócserét is magában foglaló együttműködés a Kalamazoo College (Michigan University, USA) kutatóival. A Szabadkai Műszaki Főiskolával kötött megállapodás keretében elkészítették egy hatlábú robot prototípusát. Az RMKI részt vesz a CERN LHC Grid fejlesztésében. Az RMKI CA fejlesztéssel és üzemeltetéssel kapcsolatban az SZHK egy munkatársa részt vesz az EuGridPMA munkabizottság (European Policy Management Authority for Grid Authentication) munkájában. A CERN EGEE (Enabling Grids for E-science) projektjében valamennyi földrész 260 intézménye vesz részt és szoros az együttműködésük a Magyar Grid Kompetencia Központ többi intézetével (BME, ELTE, NIIFI, SZTAKI). Az EGEE magyar részvételét az RMKI koordinálja.

Az RMKI számos munkatársa tisztségviselője vagy tagja különféle akadémiai testületeknek, NKTH-bizottságoknak, az Eötvös Loránd Fizikai Társulatnak és aktív résztvevője a nemzetközi tudományos közéletnek. A hosszú távú feladattal rendelkező testületek közül, ahol az RMKI képviseli a magyar érdekeket, a legfontosabbak a CERN Tanácsa és bizottságai, az EURATOM Scientific and Technical Committee, EFDA Science and Technology Advisory Committee (vice-chair), Joint Undertaking for ITER Governing Board, EFDA Steering Committee, az Európai Fizikai Társulat (EPS), International Astronautical Academy (Board of Trustees, International Space Science Committee), COST Domain Committee for Materials, Physical and Nanosciences, COST Action Management Committees, a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA) szakértői bizottságai, European Neural Network Society Executive Committee, EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication), az Európai Bizottság mellett működő FP7 Research Infrastructures programbizottság, az Európai Unió kormányai által létrehozott kutatási nagyberendezés-stratégiai bizottság, európai nagyberendezések irányító bizottságai, stb. Az RMKI kutatói tagjai, tisztségviselői az MTA szakmai testületeinek, a Bolyai Kuratórium szakmai bizottságának, a hazai űrkutatás irányító testületeinek (Magyar Űrkutatási Tanács, Űrkutatási Tudományos Tanács), a MTESZ tudományos egyesületeinek (ELFT és MANT). Az SZHK munkatársai tagjai az NIIF bizottságainak, illetve a Linux kernel netfilter/iptables komponensének fejlesztését végző nemzetközi munkacsoportnak.

Az RMKI számos munkatársa nemzetközi folyóiratok referense, több kutatója tagja nemzetközi folyóiratok szerkesztő bizottságának, nemzetközi konferenciák tanácsadó vagy programbizottságának, külföldi kutatóintézetek tudományos tanácsának és referensi bizottságainak. Az RMKI kutatási eredményeinek elismertségét jelzi a számos meghívott konferencia-előadás és nemzetközi bíráló-bizottsági részvétel (pl. ERC Advanced Grant Evaluational Panel, COST Proposal Evaluational Board) is.

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

Az RMKI a szűkülő lehetőségekhez képest jól szerepelt az OTKA- és NKTH pályázatokban, valamint az FP7 projektekben is. Az OTKA-H07 jelű NKTH-OTKA Alaputatási Program keretében az alap kutatás humán-erőforrásának fejlesztésére kiírt pályázaton viszont kifejezetten eredményes volt 4 nyertes pályázattal.

Az NKTH 2005-ben kiírt NAP pályázatának mindösszesen négy nyertes pályázatából kettőben az RMKI is érdekelt volt, a NAP NUKENERG pályázatban mint a konzorcium vezetője, a NAP VENEUS pályázatban pedig mint résztvevő. Számos nehézség ellenére a vállalatok úgy teljesültek, hogy sikerült mindkét pályázatnál elnyerni az újabb 3 évre szóló meghosszabbítást. A NUKENERG projektben a hosszabbításban a hangsúly az ITER építésében való részvételre, a VENEUS projektben a megépített polarizált neutronreflektométer üzembe helyezése, üzemeltetése és továbbfejlesztésére a feladat. Mindkét projektnek a tudományos célkitűzések melletti jelentősége az is, hogy technológiai fejlesztés, know-how-átadás révén jelentős innovációs potenciált létrehozva magyar vállalatoknak közreműködési lehetőséget biztosíthat mind a hazai, mind a nemzetközi kutató-fejlesztő infrastruktúra (ITER) kiépítésében. A neutron reflektométer megépítésével a régióban egyedülálló, az FP7 I3 „Access to research infrastructures” programjának keretében az Európai Unió kutatói számára pénzügyileg is támogatott hozzáférésű berendezést jött létre. A projekt 5 emberévnyi új munkahelyet teremtett.

Az European Fusion Development Agreement pályázatain az intézet kiemelt támogatást nyert el ELM mérésekre, a MAST atomnyaláb diagnosztika továbbfejlesztésére, és a COMPASS berendezésen egy újszerű mágneses tér mérő elrendezés koncepciójának kidolgozására.

Az űrfizika-űrtechnika területén egy OTKA, három KőViM-Magyar Űrkutatási Iroda, valamint öt ESA PECS (Program for European Cooperating States) szerződésük volt, ez utóbbiak a Rosetta, a Cluster, a Venus Express és a Bepi Colombo űrprogramokkal kapcsolatosak.

Az intézet résztvevője az FP6 keretprogram támogatásával létrehozott Europlanet konzorciumnak, valamint a SOTERIA (Solar TERrestrial Investigations and Archives) programnak, amely sikeresen pályázott az FP7-SPACE keretprogramban, és nyert három évre szóló, 2008. november 1-ével induló támogatást.

Az RMKI kutatói folytatták az ICEA: Integrating Cognition Emotion and Autonomy, IST-4-027819-IP című EU-s pályázat keretében megkezdett munkájukat, az éves beszámolójuk a nemzetközi értékelésekor ismét dícséretet nyert. Az EU FP6 EUREsist pályázat keretében elkészítették a szakértői informatikai rendszer prototípusát és sikeresen lezárták a pályázatot.

A „Micro-PIXE analysis of metallo-proteins” című, IAEA Co-ordinated Research Project pályázat eredményesen zárult.

Lezárult a Campus6 (GVOP - 2004 - 3.1.1) projekt, amelynek keretében szélesedett a telephelyi számítógép-hálózati infrastruktúra és szolgáltatások IPv6 támogatása. Az új hálózati protokoll megismerésével és használatba vételével az RMKI élen jár a hazai akadémiai és egyetemi intézmények között.

A MOST2 (GVOP - 2004 - 3.1.1) projekt már lezárult szakasza kapcsán komoly remény van arra, hogy a vak emberek számára kifejlesztett hordozható, és egyszerűen használható számítástechnikai segédeszközből innovációs támogatással piaci végtermék születhessen.

Az MTA kétoldalú egyezményes és TÉT megállapodásai kiegészítő mobilitási támogatást jelentettek. Az Európai Unió és a nemzetközi nagyberendezésekre építő sok száz fős multilaterális programjai mellett nagy szükség van az ilyen, néhány főt érintő, flexibilis kétoldalú együttműködésekre, további fenntartásuk fontos tudományos érdek.

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

1. Alt C, Barna D, Csató P, Fodor Z, Hegyi S, László A, Lévai P, Pála G, Siklér F, Szentpétery I, Sziklai J, Vesztergombi Gy, NA49 Collaboration: High transverse momentum hadron spectra at  $s(NN)^{1/2}=17.3$  GeV, in Pb+Pb and p+p collisions, measured by CERN-NA49. *Physical Review C* 77, Art, No.:034906 (2008)
2. Kuroda N, Torii HA, Shibata M, Nagata Y, Barna D, Hori M, Horváth D, Mohri A, Eades J, Komaki K, Yamazaki Y: Radial Compression of an Antiproton Cloud for Production of Intense Antiproton Beams. *Physical Review Letters*, 100, 203402 (2008).
3. Abbiendi G. and the OPAL Collaboration including Csilling Á, Hajdu Cs, Horváth D, Pásztor G, Vértési R: Search for Dirac Magnetic Monopoles in e+e- Collisions with the OPAL Detector at LEP2, *Phys. Lett. B* 663: 37-42 (2008).
4. Adare A, Csörgő T, Ster A: PHENIX Collaboration, Charged hadron multiplicity fluctuations in Au+Au and Cu+Cu collisions from  $\sqrt{s_{NN}} = 22.5$  to 200 GeV, *Physical Review C* 78: 044902 (2008)
5. Biró TS, Molnár E, Ván P: A thermodynamic approach to relaxation of viscosity and thermal conductivity, *Physical Review C* 78: 014909 (2008)
6. Böhm G, Stefan D: (Co)cyclic (co)homology of bialgebroids: An approach via (co)monads, *Communications of Mathematical Physics* 282: 239-286 (2008)
7. Rácz I: A simple proof of the recent generalisations of Hawking's black hole topology theorem, *Classical and Quantum Gravity* 25: 162001 (2008)
8. Schumann M, Kreuz M, Deissenroth M, Glück F, Krempel J, Markisch B, Mund D, Petoukhov A, Soldner T, Abele H: Measurement of the Proton Asymmetry Parameter C in Neutron Beta Decay, *Physical Review Letters* 100: 151801 (2008)
9. Diósi L: Non-Markovian continuous quantum measurement of retarded observables. *Physical Review Letters* 100: 080401 (2008)

10. Lin JF, Watson H, Vankó G, Prakapenka VB, Dera P, Struzhkin VV, Kubo A, McCammon C, Evans WJ: Intermediate-spin ferrous iron in lowermost mantle post-perovskite and perovskite, *Nature Geoscience* 1: 688 – 691 (2008)
11. Merkel DG, Tanczikó F, Sajti Sz, Major M, Németh A, Bottyán L, Horváth ZE, Waizinger J, Stankov S, Kovács A: Modification of local order in FePd films by low energy He<sup>+</sup> irradiation, *Journal of Applied Physics* 104: 013901 (2008)
12. Szilágyi E, Petrik P, Lohner T, Koós AA, Fried M, Battistig G: Oxidation of SiC investigated by ellipsometry and Rutherford backscattering spectrometry, *Journal of Applied Physics* 104: 014903 (2008).
13. Tunyogi Á, Tanczikó F, Osváth Z, Pászti F: Structural characterization of Fe/Ag bilayers by RBS and AFM, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms* 266: 4916-4920 (2008)
14. Nagy DL: Mössbauer effect: a dual method for myriad applications, *Hyperfine Interactions* 182: 5-13 (2008)
15. Gordo PM, Liszkay L, Kajcsos Zs, Havancsák K, Skuratov VA, Kögel G, Sperr P, Egger W, de Lima AP, Marques MFF: On the defect pattern evolution in sapphire irradiated by swift ions in a broad fluence range, *Applied Surface Science* 255: 254-256 (2008)
16. Djotyan G P, Bakos J S, Demeter G, Sörlei Zs, Szigeti J, and Dzsotjan D: Creation of a coherent superposition of quantum states by a single frequency-chirped short laser pulse, *Journal of the Optical Society of America B* 25: 166-174, (2008)
17. Földes IB, Szatmári S: On the use of KrF lasers for fast ignition; *Laser and Particle Beams* 26, 575-582, 2008 IF: 4.696
18. Lang P T, Lackner K, Maraschek M, Alper B, Belonohy E, Gal K, Hobirk J, Kallenbach A, Kalvin S, Kocsis G, Perez von Thun C P, Suttrop W, Szepesi T, Wenninger R, Zohm H: ASDEX Upgrade Team and JET-EFDA contributors: Investigation of pellet-triggered MHD events in ASDEX Upgrade and JET Nuclear Fusion 48: 095007, (2008)
19. Szappanos A, Kocsis G, Molnar A, Sarkozi J, Zoletnik S: Event Detection Intelligent Camera Development, *Fusion Engineering and Desing* 83: 370, 2008
20. Bertucci, C. et al. (12 coauthors, incl. K. Szegő): The Magnetic Memory of Titan's Ionized Atmosphere, *Science* 12 September 2008, Vol. 321. no. 5895, pp. 1475 – 1478, DOI: 10.1126/science.1159780 (2008)
21. Horányi M, Juhász A, Morfill GE: Large scale structure of Saturn's E-ring, *Geophysical Research Letters* 35/4, L04203, doi:10.1029/2007/GL032726 (2008)
22. Facskó G, Kecskeméty K, Erdős G, Tátrallyay M, Daly P, Dandouras I: A statistical study of hot flow anomalies using Cluster data, *Adv. Space Res.* 41/8 1286-1291 (2008)
23. Négyessy L, Nepusz T, Zalányi L, Bazsó F: Convergence and divergence are mostly reciprocated properties of the connections in the network of cortical areas. *Proceedings of the Royal Society B*: 275(1649) 2403-2410 (2008) DOI 10.1098/rspb.2008.0629
24. Nepusz T, Petróczi A, Négyessy L, Bazsó F: Fuzzy communities and the concept of bridgeness in complex networks. *Physical Review E* 77: 016107, (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA KFKI Rézszecke- és Magfizikai Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	211	Ebből kutató <sup>2</sup> :	119
PhD, kandidátus:	61	MTA doktora:	23
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
			34
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			283
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			248
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	177
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	9	idegen nyelven:	58
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	506,604	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	4318
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			3112
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	4
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	2	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	5	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	1
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	153	posztterek száma <sup>10</sup> :	55
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	28	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	13
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			33
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	13	Diplomamunkát:	16
		PhD-t:	24
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			1226
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			1178 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	11	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	736 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			23
		A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány:	109 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			9
NKFP:	9	A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány:	277 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			6
		A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány:	30 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			12
EU-forrásból:	5	A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány:	210 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány:	47 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévvel kapcsolatos szerződésállomány:	63 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

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

Telefon: 392-2225, Fax: 392-2226

e-mail: barsony@mfa.kfki.hu; honlap: www.mfa.kfki.hu

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

Annak ellenére, hogy témérdek gazdasági és adminisztratív nehézség akadályozta működésüket, 2008-ban az intézet fennállása óta legsikeresebb évét zárta.

Az MTA MFA kísérletes kutatóintézet, azaz területének 50%-án nagy értékű kutatólaboratóriumokat működtet. Ennek az infrastruktúrának a fenntartása nagy erőfeszítést követel, hiszen a költségvetési támogatás jószereivel csupán a kutatók bérét és járulékát fedezi. Intézeti átlagban ez kutatónként 8,2 MFt, amelyhez a fenti eredmény biztosításához kutatónként további 10,9 MFt árbevételre van szükség. Csak ezzel válik lehetővé az unikális infrastruktúra fenntartása és működtetése, amit 53 fős műszaki-kutatástámogató személyzet lát el! Az MFA esetében tehát az eredmények a tudományometriai mutatókon túl benyújtott szabadalmakban, PhD képzési és egyéb oktatási támogatásban, a tudományos eredmények ipari hasznosításában, tanácsadásban komplex módon testesülnek meg.

Az évet új szervezeti felállásban kezdték, a korábbi négy főosztályos, 12 osztályos szerkezetet, melynek feladata az intézet kutatási profiljának megszilárdítása volt, hat tudományos osztályból felépülő szerkezet váltotta fel. Az átszervezés, jó lehetőséget biztosított az újabb kutatási témák megfelelő átcsoportosítására. A vezető funkciók csökkentése folytán az osztályvezetők mellett fiatalabb helyettesek megbízására is sor kerülhetett, akik így majd - megszerezve a szükséges tapasztalatot - felnöhetnek a későbbi vezetői feladatokhoz. Sikeresen vezették be a pályázati menedzser, IPR menedzser központi funkciókat, ami a vezetés hatékonyságát támogatja.

Visszaigazoltnak látják a négy éve választott stratégiát, a radikális multidiszciplináris nanotechnológiai irányváltást, a nanoskálán elért anyagtudományi eredmények integrált nano/mikrorendszerekben való hasznosítását. A kutatógárdát egy tapasztalt főmunkatárs hazahozatalával és több fiatal posztdoktorral sikerült megerősíteniük, ami egyben komoly fiatalítást is eredményezett. Van remény a folytatásra, hiszen jelenleg is hat posztdoktoruk dolgozik vezető intézményekben külföldön. Négy fiatal kutatójuk szerzett *summa cum laude* minősítéssel PhD fokozatot, egyik tud. tanácsadójuk az SZTE c. egyetemi tanára lett. 2007 után 2008-ban is sikerült az MTA MFA egyik fiatal kutatójának Junior Prima Díjat nyernie.

Nem utolsó sorban az utánpótlás biztosítására kezdeményeztek új intézményi együttműködések, közös labort a BME TTK (elektronsugaras litográfia), BGF KKKV (molekulasugaras epitaxia), szervezték meg a NIMS-BME közös doktori képzést, rendezték meg a nagy visszhangot kiváltó középiskolás nyári tábort „Tanuljunk egymástól!” címmel. Ez nem csak az MTA vezetésének kiemelt támogatását élvezte, hanem a Kutató Tanárok Országos Egyesületének elismerését is kiváltotta. Sikerral járt az intézet presztízsének javítására, a kiemelkedő teljesítmények honorálására tett erőfeszítésük is. Az MTA MFA 2008-ban elnyerte az OKM Kármán Tódor Díját az oktatás kiemelkedő támogatásáért.

Az NKTH nemzeti platform pályázatán az MFA nyerte el az Integrált Mikro/Nanorendszerek Platform vezetésére kiírt támogatást és működteti az IMNTP platformirodát ([www.imnpt.hu](http://www.imnpt.hu)). Első EU FP7-es pályázatuk mellé négy másikat nyertek 2008-ban, háromban a munka is elindult, egyben 2009-ben kezdődik.

Felújításokkal, saját forrásból történő beruházásokkal tovább folytatták a munkakörülmények javítását. Három új labor, három dolgozószoba, egy archívum kialakításával és a főépület egyik folyosójának rendbetételével léptek előre. Nagy segítséget jelentett az MTA elnöki keretből különböző címeken elnyert támogatás, aminek megfelelő forrást így szinte teljes egészében műszerfejlesztésre fordíthatták. Új beszerzés egyebek közt a Süss MicroTec MA6/BA6 tip. maszkillesztő, nanoimprinting, szeletkötő berendezés (94MFt), fotoreziszt processzálo sor (7MFt), a két új nanomanipulátor a FESEM-ben (12MFt), a Zetasizer nanorészecske mérő (17MFt), a Woollam 2000DI spektroszkópiai ellipszométer (38MFt), az AIST SmartSPM1010 típusú AFM készülék (21MFt), a Tribológiai vizsgálóállomás (17MFt) és a zártkörű TEM hűtőrendszer (12MFt). Ezekkel a fejlesztésekkel biztosítható a pályázóképességük néhány új tématerületen.

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

2008-ban a kutatás 6 osztályvezető irányításával önálló témagazdálkodású kutatócsoport ill. laboratórium kereteiben folyt, *a beszámoló követi a szervezeti sémát.*

*Mikrotechnológiai osztály (52 fő – 19 kutató (ebből 5 PhD hallg.) kvrt.:212 MFt, szt.:256 MFt)*

Az osztály feladata a mikro- és nanorendszerek integrációja; szilícium és vegyületfélvezető alapú struktúrák, érzékelők, fényemittáló és -detektáló eszközök formájában, napelemek kutatása és fejlesztése, előállítás és vizsgálata ionsugaras technikákkal és elektromos mérési módszerekkel.

A MEMS kutatás-fejlesztés homlokterében a Si tömbi mikromechanikai eljárások állnak.

OTKA támogatással folytatódott az ATOMKI-val együttműködve nagyenergiájú protonszugár mikronyaláb direkt írással és az azt követő szelektív pórusos Si marással vastag, a felületre *merőleges oldal falú struktúrák előállítása elsősorban mikrofluidikai alkalmazásokra.* 2008-ban sikeresen kifejlesztették a PDMS polimer fedőréteg technológiát, amit integrálva a mikrogépészeti eljárással létrehoztak egy szabadon forgó mikroturbinát mikrofluidikai alkalmazásra.

Szintén mikrofluidikai alkalmazásra fejlesztettek ki szilícium tömbi mikrogépészettel egy *termikusan aktuált szelepet,* ami a leválasztott dielektrikum rétegbe ágyazott platina mikrofűtőtest ki-be kapcsolásával vezérelhető. A szelep két oldalán pórusos Si mikrogépészettel és PDMS polimer alkalmazásával mikrocsatornákat alakítottak ki.

OTKA támogatással a BME Általános és Analitikai Kémia Tanszékével a 3D MEMS technológiával megvalósított membránokon fókuszált ionnyaláb segítségével létrehozott *nanopórusok biológiai érzékenyítését* oldották meg. A nanométeres skálán lejátszódó kémiai kölcsönhatások megértése szempontjából egyre reményteljesebb a bioanalízis, a kémiailag módosított nanopórusok alkalmazása. A nanopórusos érzékelés legnagyobb előnye, hogy a transzport-moduláción alapuló erősítési tulajdonságok a molekula szintű detektálást is lehetővé teszik.

A „Környezet állapotának monitorozására alkalmas komplex fotoakusztikus mérőrendszerek fejlesztése és terepi alkalmazása” NKFP projekt keretében az SZTE Lézerfizikai Tanszéki

Kutatócsoportjával az extrém vékony membránokon alapuló nagy érzékenyséű *mikronyelv (cantilever) típusú nyomásdetektor* megvalósítási technológiáját dolgozták ki. Megvizsgálták a foto-akusztikus mérőkamra, az optikai mikrofon és a korábban sikerrel megvalósított mikrofüttőtest, mint gerjesztő forrás integrálhatóságát.

Az NKFP „Léggör” projekt (koordinátor KFKI AEKI) záróévében a röntgenfluoreszcenciás (TXRF) mérési módszerhez korábban Cr-ból megvalósított mérőmintákon túl az UV megvilágítás időtartamának növelésével pontosabb *permalloy standardokat* készítettek  $2 \times 2 \text{ cm}^2$ -es Si lapkákön. Az MFA referenciaminták használata a TXRF mérési módszer kalibrálásához rutinszerűvé vált.

Új MEMS témaként *agyi elektródák fejlesztését* kezdték el az MTA Pszichológiai Kutatóintézetével és a PPKE-ITK-val együttműködésben. Vékony Si szelet kétoldali megmunkálásával adott geometriájú mikroméretű tűt készítettek, melynek felszínén szigetelt platina vezetékek futnak. Az agyban használt elektródon a vizsgálandó elektrolit a patina huzalokhoz kontaktus ablakokon keresztül juthat el. A  $200 \mu\text{m}$  vastag Si-on alkalmazott teljes technológia kb. 36 egyedi standard mikrotechnológiai lépésből és több speciális nedves kémiai marásból áll. Az első *in vivo* kísérletek biztatóan zárultak az MTA PKI-ban.

A WESZTA-T Kft-vel folytatódott a megbízható *mikro-pelliszorok jobb gyárthatóságának* kutatás-fejlesztése, ami a Pt szemcséket hordozó pórusos rétegnek közvetlenül a mikrofüttőtesteken való kialakítását célozza. Vákuum-gőzölt Al réteg anódikus oxidációjával állítottak elő pórusos  $\text{Al}_2\text{O}_3$  rétegeket, amin hexaklórplatinasav felvitelével vagy Pt monoréteg porlasztásával kontaktmaszkon át alakítják ki a Pt katalizátorszemcséket.

PhD kutatás keretében folyik a CO gázban magas hőmérsékleten hőkezelt oxidált Si szeleteken *orientáltan kialakuló egykristályos 3C-SiC szemcsék vizsgálata*.  $\text{SiO}_2$ -vel fedett poliszilícium rétegeket kezelték CO-ban, megállapítva, hogy a keletkezett SiC szemcsék struktúrája és mérete függ a poliszilícium szemcseméretétől. Nagyméretű szemcsék esetén a szemcsehatárok mentén jelentős a nagyméretű SiC ( $D > 50 \text{ nm}$ ) szemcsék képződése, míg kissetemcséjű poliszilícium esetén a szemcsék felületén keletkeznek kisméretű SiC ( $D < 20 \text{ nm}$ ) szemcsék. Új K+F téma 2008-ban az *infravörös termikus szenzor* fejlesztése a japán Tateyama Kagaku cég számára. A kisméretű MEMS eszköz közvetlenül alakítja át az elnyelt sugárzó hőt elektromos feszültséggé. A  $\text{Si}_3\text{N}_4$  membránon kialakított pSi/nSi kontaktusokat tartalmazó termopár eszköz első változatainak érzékenysége  $10\text{-}100 \text{ mV}/^\circ\text{C}$  tartományba esik.

A MATTSON céggel közösen folytatták a *deutériumos passzíválás technológiájának kidolgozását* és vizsgálatát. Magas hőmérsékletű gőzfázisú nehézvízes kezelés után a Si felület hidrofóbbá válik, az ezt követő hőkezelés hatására  $\text{NH}_3$ -ban kialakuló dielektrikum réteg fizikai paraméterei jobbak, a felületi hibásűrűség kisebb. Ezek teszik alkalmassá a deutériumos felületkezelés beépítését a *32 nm gate-hosszúság alatti CMOS technológiai sorba*.

Nemzetközi együttműködések keretében folytatják a *dielektrikumba eltemetett egykristályos nanoszemcsék* ( $d < 5 \text{ nm}$ ) tulajdonságainak kutatását.  $\text{Si}_3\text{N}_4$  és  $\text{SiO}_2$  rétegekben létrehozott Si egykristály szemcsék töltéstároló képességét tanulmányozták. A technológia optimalizálásával a Si szemcsén a töltések interpolált tárolási ideje 10 évnél hosszabb a kicsiny szivárgás révén, ami félvezető flash- memória alkalmazásukat perspektívikussá teszi.

NKFP projekt keretében folynak az *ionimplantációs kutatások*, melynek célja a technológiai sorba illeszthető in-line mérőberendezés létrehozása sekély, kisdózisú implantációk egyszerű, gyártásközi jellemzésére. A minta elektromos tulajdonságai ezzel nem csak az implantációt



követő hőkezelés után lesznek mérhetőek, hanem a létrehozott roncsoltság hatásainak kimutatásával az implantáció maga is minősíthető.

Az MFA-PPKE spin-off Tactologic Kft-vel közösen folyik a *tapintásérzékelő MEMS eszközök* integrálása komplex rendszerekbe. Kétsatornás USB interfész teremti meg a szenzor és a kiértékelő, megjelenítő számítógép közötti kapcsolatot. A kapcsolódó vezérlő-kiértékelő programtanulási funkcióval is rendelkeznek, így pl. betanítható felületi textúrák felismerésére.

Új nagyfényességű struktúrákat hoztak létre és javították a kontaktusok fizikai tulajdonságait *közeli infravörös tartományban működő LED szerkezeteikben*. Az LPCVD technológiával InGaAs(P)/InP félvezetőkől kissorozatban gyártott LED-eket értékesítették.

Megrendelésekre felületi hullámszűrők (SAW) kissorozatú gyártása folytatódott 2008-ban is.

2008-ban avatták fel az MFA-ban a BMF KKVK-val közös molekulaszugár-epitaxiás labort. A hallgatók itt egy speciális félvezető technológiával ismerkedhetnek meg, ami része a kutatási arzenálnak.

A napelem kutatás-fejlesztés fókuszában változatlanul a CIGS típusú vékonyréteg napelemstruktúrák technológiájának kutatás-fejlesztése állt.

2008-ban lezárt PhD kutatás keretében gyakorlatilag megoldottnak tekinthető az *átlátszó, jó vezetőképességű Al-adalékolt ZnO réteg* és a fémes Mo hátoldali elektróda-rétegek porlasztása. Ugyancsak rutinszerűen működik a lézervágó modul segítségével a fenti rétegek laterális strukturálása.

Nagyprojekt keretében, OTKA támogatással indult széleskörű összefogással (MFA, ATOMKI, BME) az *együttlétegetett négykomponensű aktív félvezetőréteg és a heteroátmeneti pufferréteg kialakításának* kutatása. A PhD kutatás keretében is vizsgált technológia kritikus összetétel és homogenitási követelményeit folyamatos üzemmódban, üveg szubsztráton, zártkörű vákuumrendszerben kell teljesíteni. Ez a fizikai létegetés mellett szükségesé teszi kémiai, atomi rétegleválasztási módszer implementálását is a kísérleti CIGS gyártósoron.

A napelem kutatások elengedhetetlen funkcionális minősítő módszere az ún. „*műnap*” alkalmazása a *fotoelektromos konverzió hatásfokának meghatározásában*. Az MFA-ban működtetett készülékben nagyméretű napelemtáblák is minősíthetőek a napfényéhez hasonló spektrális eloszlású megvilágításban. A berendezést referenciaminták beépítésével tették alkalmassá a különféle alapanyagú napelemtáblák minősítésére, azaz amorf Si, mikrokristályos Si és CIGS alapú eszközök bevizsgálására is. A labor akkreditációjának előkészítése megkezdődött.

A Mikrotechnológia labor infrastruktúrájának folyamatos fejlesztése során 2008-ban sikerült két alapvető berendezést beszerezniük, amelyek új technológiákat valósítanak meg.

- Alapvető MEMS/NEMS technológiai berendezés az ún. *szeletkötő eszköz*. Két vagy több strukturált Si szelet illesztett egymáshoz kötésével háromdimenziós építkezést tesz lehetővé.
- A *nanoimprinting technológia* segítségével nagyfelületű nanostruktúrák létrehozása érdekében szubmikronos ábrák „nyomtathatóak” olcsón, a „nanofelbontású fotolitográfia” kiváltása révén.

Ez a két új technológia nagy távlatokat nyit a nanotechnológia, a nanofunkciók lehetőségeinek a mikrorendszerekbe történő integrálása területén. Ezek a módszerek alkalmasak olyan határterületek megnyitására is, ahol speciális funkciók megvalósítása érdekében a félvezető technológia kiegészül fotonikai és biotechnológiával is.

*Nanoszerkezetek Osztály* (16 fő, 11 kutató (ebből 7 PhD hallgató), kvtt.: 61MFt, szt.: 67MFt)

Az osztály kutatási tevékenysége a szén nanoszerkezetek, a természetes fotonikus kristályok és az optikailag aktív nanorendszerek vizsgálata köré csoportosítható.

Az év során a fő hangsúlyt a grafén (egyetlen atomi réteg vastagságú grafit) és néhány atom rétegű grafit (NRG) kutatása kapta:

- Továbbfejlesztették és rutinszerűen alkalmazzák a grafén előállításának ragasztószalaggal történő, mechanikai exfoliáláson alapuló módszerét,
- megkezdték nikkel felületre CVD módszerrel történő grafén/NRG réteg növeszthetőségének vizsgálatát. Technológiai alkalmazások céljára ez az eljárás tűnik ígéretesebbnek.

PMMA bevonat alkalmazásával sikeresen demonstrálták Si/SiO<sub>2</sub> hordozóra lerakott, jellemzően néhányszor 10µm laterális méretű grafén lemezek átjuttatását majd lokalizálását más hordozón. Az *egyetlen atom vastagságú lemezek* vezető, illetve szigetelő hordozók közötti kontrollált transzferét ez a módszer teszi lehetővé.

Irodalmi ötlet alapján sikerült új módszert kidolgozniuk mikromanipulátor segítségével *grafén kontaktálására* indium forrasztóanyag alkalmazásával. Ezzel lehetővé vált az egyedi grafén/NRG szerkezetek rutinszerű STM vizsgálata, elektromos tulajdonságaik mérése és alakítása az általuk korábban kidolgozott STM litográfiai módszerrel. A fent leírt módon kontaktált, Ar<sup>+</sup> ionokkal besugárzott grafén mintákat pásztázó alagútmikroszkópiával (STM) és alagútspektroszkópiával (STS) vizsgálták.

Sikerült atomi felbontású leképezést elérniük, a képeken jól látszanak az ionbecsapódás okozta hibák. A hibák közelében az elektronsűrűség-eloszlás oszcillációit észlelték, amit az elektronhullám hibákon való szóródásával, valamint a Fermi-sebesség lokális megváltozásával magyaráztak. Megmutatták, hogy az *ionbesugárzás alkalmas a grafén lemezek elektronszerkezetének tervezett alakítására*.

Az In kontaktusokkal ellátott grafén lemezekén végzett transzport mérések azt mutatták, hogy a minta viselkedése ionos besugárzás hatására a félvezető viselkedéstől a fémesebb viselkedés felé változik. Ugyanezekben a mintákban a fotovezetés jelenségét mutatták ki.

Folytatták a *grafén nanoobjektumok* korábban kidolgozott, STM litográfián alapuló, közel atomi pontosságú és a krisztallográfiai orientációhoz illeszthető *vágási módszerének* fejlesztését, segítségével összetettebb objektumok, háromszögek és párhuzamos szalagokból álló „nanofésűk” kivágását végezték el.

Az *elektron hullámcsomag-terjedés* jobb megértésére különböző geometriájú (egyenes szalag, illetve könyök) grafén nanoszalagokon keresztül numerikus szimulációkat végeztek.

Grafén lemezek kontrollált oxidációjának vizsgálata során megmutatták, hogy a grafén lemezek gyorsabban oxidálódnak, mint a többretegű grafitlemezek.

Folytatták szén nanocső (CNT) alapú gázszenzorok kutatását. A véletlenszerű szén nanocső hálózatok gázokra mutatott érzékenységét elsősorban a térvezérlés hatására mutatott

ellenállás-tranziens elemzésével próbálták jellemezni. Ezen kívül vizsgálták az atmoszféra megváltozásának hatását, továbbá a szenzor tisztulásában (az adszorbeálódott molekulák deszorpciójában) feszültségimpulzus hatására fellépő tranzienszt.

STM és STS méréseket végeztek nitrogénnel adalékolt szén nanocsöveken. Kimutatták, hogy a N adalékolás a Fermi szint felett többletállapotokat eredményez. Az STM topográfiai felvételeken a csövek TEM-ben látott „bambuszos” szerkezete is észlelhető. EDS mérések alapján az n-adalékolás mértékét kb. 10%-nak találták.

A bioinspirált kutatások területén vizsgálták és jellemezték a *Trigonophorus rotschildi varians* bogár fedőszármányainak színét adó fotonikus kristálystruktúrát. Megfigyeléseik szerint ez sok kitinlemez rétegből áll, melyeket véletlenszerűen elhelyezkedő, rájuk merőleges oszlopok kötnek össze. Ezt az *újszerű, interkalált szerkezetet eddig nem alkalmazták a mesterséges fotonikus kristályokban.*

Célul tüzték ki hasonló optikai tulajdonságú, bioinspirált szerkezetek mesterséges előállítását, ehhez amorf  $\text{SiO}_x$  és SiGe rétegekből párologtatással multiréteg szerkezetet állítottak elő, majd ionsugaras marással az oszlopoknak megfelelő furatokat hoztak létre. Az így kialakított oszlopos multirétegen végzett pásztázó elektronmikroszkópos és optikai spektroszkópiás vizsgálatok megmutatták, hogy a *mesterségesen létrehozott nanoarchitektúra hasonló viselkedést mutat, mint a biológiai modell.*

*Kerámiák és Nanokompozitok Osztály* (17 fő, 11 kutató (ebből 3 PhD hallgató), kv: 72 MFt, szt: 73 MFt)

Az osztály feladata a kerámiák és különböző nanokompozitok előállítási technológiája, a mikro- és nanoszerkezet valamint az anyagtulajdonságok közötti összefüggések kutatása. Kiemelt feladata a nanopreparációs, nanolitográfiai eljárások (FESEM-FIB-IBAD, elektronsugaras litográfia, Langmuir-Blodgett, kémiai nanopreparáció, stb.) fejlesztése és rendelkezésre bocsátása az MFA-n belüli és kívüli kutatói társadalom számára. Feladata továbbá az ANTE Kft. keretében folyó műszaki kerámia szerszámok és alkatrészek kissorozatú gyártásának szakmai támogatása.

Lényeges előrehaladás történt a *karbonnal erősített szilícium-nitrid alapú kompozitok szerkezetének megértésében.* A villamos vezetőképességet a karbon fázis mennyisége és eloszlása határozza meg. Ha a kerámia váz ki tudott alakulni, a vezető fázis csak az üregekben foglalhat helyet. Ugyanakkor esély van a kristályos szemcséket összekötő amorf fázis megtervezésére.

A SVEDNANO projekt keretében a technológia különböző fázisaiban oxidáló hőkezelést alkalmazva oxinitrid fázis kialakulását érték el. Réteges kompoziton, különböző szén nanocső- illetve korom-tartalmú rétegek kombinációjával biztató eredményeket kaptak.

Biokompatibilis *hidroxi-apatit tartalmú nano- és mikroszemcsés kompozitokat* fejlesztettek ki tojásbély felhasználásával. Egyszerű, telített gőzfázisból történő rétegleválasztási eljárásuk alkalmas hidroxi-apatit hordozók kalciumfoszfát nano- és mikrorétegekkel, -szálakkal való bevonására, amivel lényegesen növelhető a kompozit szilárdsága.

MTA-OTKA-NSF projekt keretében folytatták a *polimer alapú biokompatibilis kompozitok* előállítását és vizsgálatát. A 2008-ban bevezetett “electrospinning”, azaz elektromos fonási módszerrel mikro- és nanoszálak morfológiájú, azaz nagy fajlagos felületű, biodegradálabilis

polimer–hidroxipatit kompozitokat állítottak elő. A polimer szálban jól diszpergált nanoszemcsés hidroxipatit javíthatja a csontosodás kialakulását.

Másik MTA-OTKA-NSF projektjük keretében folytatódott a „Nyitott szerkezetű volfrámoxidokból és rokonvegyületeikből készített érzékelő rétegek fejlesztése és jellemzése”. *Nyitott szerkezetű és egyidejűleg nanoszemcsés morfológiájú volfrámoxid-rétegeket eredményesen alkalmazták ammónia és nitrogénoxid gázok érzékelésére.*

Az osztály új kutatási iránya „A vezetőképesség moduláció ZnO nanoszálakon bioreceptorokkal” (2009-től OTKA támogatással). *ZnO nanoszál* esetében nanorészecskés maszkolást és a nedves kémiai növesztést ötvözve máris sikerült az eddigi legnagyobb hossz/átmérő arányt (~30  $\mu$ m/30nm) elérni, aminek nagy jelentősége lehet nagy érzékenységgű kémiai vagy biológiai érzékelésben. Ugyancsak sikerült egykristályos ZnO és ZnO nanoszál felületére flagellin fehérjéket rögzíteni. A fizikai vagy kémiai úton kötött fehérjék sűrűsége erősen függ a kristály felületi orientációjától.

Ugyancsak új *ZnO* kutatási irány az orientáltan növesztett ZnO nanoszálak piezoelektromos tulajdonságainak kutatása és alkalmazása nanomechanikai szenzorikai célra. Ez a téma 2009-től szintén OTKA támogatással folyik.

Folyik az osztályon tervezett legújabb kutatási irány, a *polimer alapú nanokompozitok, nanoelektronikai és fotovoltaiikus szerkezetek kutatása* preparatív és karakterizációs bázisának kiépítése, az együttműködések szervezése.

*Komplex Rendszerek Osztálya* (12 fő, 7 kutató (ebből 1 PhD hallg.), kv. 67 MFt, szt: 13 MFt)

Az osztály feladata összetett: komplex rendszerek kutatása a statisztikus fizika felhasználásával evolúciós játékelméleti modellekben, nemegyensúlyi rendszerekben, önszervező mintázatok kialakulásában, a népdalkincs szerkezeti analízisében, továbbá a kép- és jelfeldolgozás multidiszciplináris alkalmazásainak fejlesztése.

A Forschungszentrum Rossendorf kutatóival kiépített együttműködés keretében a statisztikus fizika elméleti módszereivel és numerikus szimulációkkal vizsgálták az *ionbombázás hatását a szilárdtestek felületén kialakuló felületi mintázatokra*, amit a partnerek kísérleti úton verifikáltak.

*Evolúciós játékelméleti modellekben* kutatták az önzetlen (tisztességes) magatartás kialakulásának körülményeit az önző játékosokból álló közösségekben. A 2008-as esztendő legnagyobb figyelmet kiváltó eredménye az úgynevezett befolyásos egyének szerepének tisztázása volt.

Az egyének jövedelme a vizsgált evolúciós játékelméleti modellekben a szomszédoktól származik. Mértéke attól függ, hogy a játékosok az egyéni hasznukat vagy pedig a közösségi jövedelem maximálását kívánják-e elérni. A *befolyásos egyének szerepe* a stratégia átadásánál jelentkezik oly módon, hogy ezek a szereplők, másokhoz képest sokkal nagyobb hatékonysággal tudják meggyőzni szomszédaikat, hogy őket (pontosabban a magatartásukat) kövessék. A társadalmi dilemmáknak megfelelő helyzetekben (pl. fogolydilemma) a stratégiaátadás ilyen változata a tisztességes, azaz a közösségi haszon maximálására törekvő befolyásos egyéneket hozza előnyös helyzetbe és őket teszi az egész társadalom számára követendő példává.

A modellvizsgálatok számszerűen mutatták ki a tisztességes magatartás elterjedésének mértékét, ha változtatták a befolyásos egyének gyakoriságát, befolyásoló képességük hatékonyságát, a társadalomban jelenlevő bizonytalanságok (zaj) mértékét, illetve a kapcsolatrendszer merevségét. Megvizsgálták, hogy mi történik akkor, ha a befolyásolási képesség korhoz vagy időben változó tekintélyhez kötődik. Ezek a vizsgálatok egyértelműen mutatják, hogy *a társadalmi dilemma helyzetekben előnyös* a közösség számára a stratégiaátadásában mutatkozó egyéni különbözőség, ha az párosul *az eredményesebbek előnyhöz jutásával* (darwini szelekciójával).

Kiemelt és növekvő mértékben sikeres témájuk *a népdalkincs szerkezeti analízise* a zenei gyökök kimutatására. A népzenei dallam elemzések mennyisége és értéke is folyamatosan növekszik, mert az összehasonlító vizsgálatokat a bővülő nemzetközi együttműködések eredményeképpen egyre több nép népdal-készletére lehetett kiterjeszteni.

*A képfeldolgozás-alapú informatikai kutatásokban* megszerzett korábbi ismereteik birtokában bővítették módszereik alkalmazásának körét (pl. a mágneses rezonanciás képalkotás területére). Az alapalgoritmusok fejlesztése során adoptáltak jónéhány olyan módszert, amelyek már sikeresnek bizonyultak a népzenei dallamok elemzésénél.

*Vékonyréteg-fizika Osztály* (27 fő, 18 kutató (ebből 5 PhD hallg.) kv. 132 MFt, szt. 110 MFt )

Az osztály feladatai három, összefüggő csoportba sorolhatók:

- modell rendszereken derítik fel a vékony-, és nano-rétegekben, nanokompozitokban lejátszódó szerkezetépítő folyamatokat,
- alapkutatási eredményeiket alkalmazzák konkrét ipari problémák megoldására,
- felület-fizikai vizsgálatokkal, metodikai kutatásokkal, fejlesztésekkel teszik hatékonyabbá, mennyiségileg pontosabban értelmezhetővé az előző két feladat-csoporthoz szükséges szerkezetvizsgálati eljárásokat.

Az FP6 INNOVATIAL projekt keretében az új bevonatok szerkezete és tribológiai tulajdonságai közötti összefüggések feltárása volt a feladat a technológia fejlesztéséhez. TiAlN ittriummal történő adalékolása vonatkozásában tisztázták az Y adalék mennyiségének hatását a hcp fázis kialakulására, meghatározták a hcp fázis keletkezését előidéző szegregációs mechanizmust. CrAlN rendszeren kimutatták, hogy a reaktív porlasztás során az AlN oldhatósága az fcc CrN-ben erősen függ a H parciális nyomásától. Ezzel feloldották azt az eddigi nagy technológiai bizonytalanságot, hogy ellenőrizhetetlen volt a bevonatok tribológiai tulajdonságait lerontó hcp AlN fázis megjelenése. Modellt dolgoztak ki a CrAlN fázis szerkezet-kialakulásának leírására a teljes összetételi tartományban.

A „Felületi atomi folyamatok szerepe többfázisú vékonyréteg nanostruktúrák kialakulásában” c. OTKA és egyben PhD kutatási projekt a fázisképződés szegregációs folyamatainak közvetlen feltárására irányul. Több elem egyidejű kondenzáltatásával kialakuló Cu-Ag rétegekben a fázisok kialakulására jelenleg kétféle szegregációs modellt használnak. Egyik az új, a “második” fázisok képződését a képződő fázisba be nem épülő (felesleg) adatomoknak a felületi rétegben „folyamat-indukált” kinetikai szegregációjához köti (P.B.Barna, M.Adamik, Science and Technology of Thin Films, eds.: F.C.Matacotta and G.Ottaviani, World Scientific Publishing Co., (1995) pp. 1-28.). A Veprek modell viszont a spinodális szétválást tekinti alapfolyamatként (S.Veprek, S.Reiprich, TSF 268(1995)64). Elsőként tárták fel a két folyamat egyidejű létezését a Cu és Ag együttes kondenzáltatásával előállított rétegekben, és igazolták, hogy az anyagrendszerekhez kötődő folyamatok alapvetően eltérő szerkezet-

típusok kialakulásához vezethetnek. A spinodális szétválás rövidtávú térfogati diffúziós kinetikával elsősorban epitaxiális nanokristályokat (2-4 nm) eredményez a molekula-dinamika alapján. A kinetikai szegregáció nagyobb méretű fázis-tartományok képződéséhez vezethet, és alapja lehet a szemcsehatár-fázissal stabilizált nanokompozit szerkezetek kialakulásának. Mechanizmusa a növekedési felületen zajló lépcsőmozgás és felületi diffúzió.

Az FP6 FOREMOST projektben sűrűlódáscsökkentő bevonatok fejlesztése a feladat új, fullerénszerű (10-30 nm átmérőjű) szervesetlen, nanorészecskéknek (pl. MoS<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub>) TiN vagy DLC, műanyag és sol-gél technikával készült SiO<sub>x</sub> rétegekbe történő beépítésével. Az osztály vékonyréteg- és TEM ismereteit alkalmazza a projektben.

Az FP7 HIGH-EF projektben nagykristályos Si napelemek fejlesztéséhez a hibaszerkezet és a technológiai paraméterek összefüggésének feltárásával járultak hozzá. A leválasztási és hőkezelési paraméterek optimalizálásával a homogén magképződés tartományát elkerülve sikerült a nagyméretű mag-kristályokon epitaxiálisan nagy kristályokat növeszteniük.

Az FP6 HYPHEN projekt keretében megmutatták, hogy a kompozit hordozókra (ezek csak néhány száz nm Si, vagy SiC réteget tartalmaznak) növesztett GaN rétegek hibasűrűsége azonos nagyságrendbe esik a tömbi hordozókra növesztett GaN rétegekével. Ezzel lehetővé vált a drága hexagonális SiC szeletek többszöri (rétegenkénti) felhasználása. Processzált rétegekből készített HEMT (High Electron Mobility Transistor) eszközök fémezését vizsgálva rámutattak a fémrétegek ötvöződésére. Demonstrálták a rétegek és eszközök szerkezetének hasonlóságát nagyméretű (3 és 4") kompozit hordozókon is. Korábbi kísérleteikből ismert, hogy SiO<sub>2</sub>/Si szeleteket CO-ban hőkezelve epitaxiás, köbös SiC szemcsék kaphatók. 2008-ban megpróbálták ezek nukleációját ionimplantálással elősegíteni. Adott paraméterek mellett csak hőkezeléssel 25%-os fedettség érhető el, 18 nm-es átlagos méretű SiC szemcsékkel. Ha a mintát a CO-ban való ugyanazon hőkezelés előtt szénnel implantálták, (40 keV, 4x10<sup>15</sup>cm<sup>-2</sup>, 550°C), a fedettség 31%-os, a szemcsék átlagosan 11 nm-esek.

Az elektrodiffrakció feldolgozására kidolgozott módszerek továbbfejlesztésével meg tudják határozni nanokristályos fázisok térfogati hányadát, illetve a textúrált összetevő mennyiségét.

A visszaszórási tényező (BF) alapvető paraméter az AES analízisben, ami közvetlenül nem mérhető. Jablonski és munkatársai kidolgoztak egy MC rutint a BF meghatározására elvileg tetszőleges szerkezetű minta esetére. Ennek a modellnek az első kísérleti alkalmazását végezték el több réteges C/Ni minta Auger elektron spektroszkópiai mélységi feltérképezésénél. A számolás és a mérés között kiváló egyezés volt.

XTEM képet készítettek a FIB-bel kevert rétegről, ami az Auger elektron spektroszkópiai eredménynél élesebb határfelületet mutat a kevert és nem kevert réteg között. Diffrakcióval bizonyították, hogy az ionkeverés során Ni<sub>3</sub>C keletkezik. A kevert réteg vastagsága, a keletkezett molekulák száma a dózis 0,6 hatványával nő, ami közel van a diffúzió alapján várható gyökös növekedéshez. A minta duzzadása magyarázható, az éles határfelület nem.

Ta/C és C/Ta mintán is meghatározták a Ta/C relatív porlasztási hányadot. A rendszer erősen aszimmetrikus keveredést mutat, a Ta/C anomálishan széles, míg a C/Ta határfelülete atomi élességű. A kiértékelési algoritmus jóságát mutatja, hogy a porlasztási hányad a két mintára ennek ellenére ugyanazt az értéket adja.

A felületi gerjesztési paraméter meghatározható a kísérletileg mért és elméletileg számolt rugalmas csúcs arányából. Az algoritmust Goto abszolút adataira alkalmazták és a 0,5-3 keV energia tartományban szilíciumra és nikkelle kiszámolták a felületi gerjesztési paramétert.

*Fotonika Osztály* (22 fő, 14 kutató (ebből 2 PhD hallgató) kvt.: 107 M Ft, szt.: 92 M Ft)

Az Osztály feladata roncsolásmentes (optikai és mágneses) anyagvizsgálati módszerek fejlesztése és alkalmazása, új típusú integrált-optikai, fotonikus szerkezetek kutatása, valamint optikai elven működő - beleértve a bioreceptorokat alkalmazó - érzékelő rendszerek fejlesztése.

A LOGIMARKER AKF projekt: „Ferromágneses anyagok jelölése lézerrel beírt vonalkóddal” 2008-ban zárult. Célja lézeres módszerrel beírt logisztikai célú „láthatatlan” vonalkód optimalizálása és a *kiolvasásához szükséges eljárás és mérőfej kifejlesztése*. A projekt keretében nem csak a mérőfejet hanem a kiolvasáshoz alkalmas mérő-/dekódoló-szoftvert is elkészítették. Az aláírt hasznosítási szerződéssel rendelkező projekt eredményeiről a Magyar Televízió Géniusz c. műsora készített felvételt.

Az FP7 NANOMAGDYE projekt: „Orvosi célra alkalmazott nanoméretű mágneses részecskék detektálása” novemberben indult. A sikeres előkísérletek célja a Fluxset örvényáramú *mérőfej alkalmazhatóságának igazolása volt nagyérzékenységű mágneses AC szuszceptibilitás mérések elvégzésére*.

*Mágneses hiszterézis alhurkok mérésén alapuló roncsolásmentes mérés technikával a Universal Network for Magnetic Non-destructive Evaluation nemzetközi hálózatban különböző módon hőkezelt alacsony széntartalmú acél mintákat minősítettek. A hőkezelések a neutronbesugárzás hatására kialakuló anyagkifáradást modellezték. Cél a mágneses módszerek elterjesztése a gyakorlatban, elsősorban erőművi acélokban. Bizonyították módszerük alkalmasságát az anyagban bekövetkező degradáció – más laborok egyéb mágneses módszereinél jóval érzékenyebb – nyomon követésére.*

Az FP6 ANNA projekt végcélja egy *nemzetközi virtuális minősítő labor* létrehozása. Ebben nagy szerepet kap a 2008-ban egy új Woollam M2000DI spektroszkópiai ellipszometrével kiegészített MFA ellipszometria labor, melynek akkreditálása jól halad. A projekthez kapcsolódó kutatási-metodikafejlesztés az OTKA K61725 témában folyik:

- Pórusos Si nanokristályos félvezetők dielektromos függvényének parametrizálása;
- Flagellin fehérjék immobilizációjának *in situ* nyomonkövetése folyadékcellában;
- Ionimplantált CdTe ellipszometriai és ionsugaras analitikai vizsgálata;
- He implantálása ék alakú oxidon keresztül szilíciumba;
- Kisenergiájú implantáció vizsgálata ultrasekély átmenetekhez;
- SiC ionimplantációja, oxidációja;
- Fotonikus szerkezetek ellipszometriai modellezése.

Az NKTH-OTKA támogatással folyó „Hullámvezetők és diffraktív optikai elemek létrehozása ionimplantációval” c. projektben a KFKI RMKI Van de Graaff gyorsítójában 1,5 MeV-os  $N^+$  ionok implantációjával *csatorna- és sík hullámvezetőket készítettek amorf és kristályos anyagokban* együttműködve az Instituto de Fisica Nello Carrara (IFAC) kutatóival. Interferencia-fáziskontraszt mikroszkóppal tanulmányozták az ionimplantáció okozta törésmutató-változás dóziszfüggését. A működőképességet olasz kollégák sötét vonalas spektroszkópiai mérésekkel igazolták, az ionimplantációval módosított tartományok komplex törésmutatóját spektroszkópiai ellipszometriával az MFA-ban határozták meg. Az ionimplantált felületeken mért spektrumok értelmezésére háromréteges optikai modellt konstruáltak.

Az NKFP PVMET\_08-ban *vékonyréteg napelemtechnológiákhoz* fejlesztenek ellipszometriás kiértékelési módszereket. Elkészítették a pontforrásból pin-hole kamerába képező szélesszögű

ellipszométer spektrális változatát. Folyik a nemzetközi szabadalmaztatás, piacfelmérési támogatást nyertek a ValDeal-projektpályázaton. 400 nm-ről majdnem 320 nm-ig sikerült az alsó mérési határt leszorítani, ami a vékonyréteg napelemtechnológiákhoz (Si első direkt átmenete, ZnO gap-energiája) fontos.

Egy posztdoktori OTKA és egy hazatelepülő Marie Curie ösztöndíj támogatásával folyik a *flagellin alapú szenzorok fejlesztése*.

- OWLS technikával sikeresen detektálták flagellin fehérje filamentumok felületi immobilizációját.
- Kifejlesztették és beüzemelték a bio-ellipszometriai folyadékcellát, flagelláris filamentumok immobilizációját és adszorpcióját 30 nm SiO<sub>2</sub> felületén vizsgálták.
- Svájci licence alapján hibrid hullámvezető-interferométer konstrukciós kísérletek folynak nagy érzékenységű, optikai kiolvasású érzékelőként történő felhasználásra.

A 2008-ban zárult NKFP AQUANAL téma keretében *két szabadalmat jelentettek be* „Mérési elrendezés és eljárás vízfelületen megjelenő folyékony szénhidrogén-szármaszék detektálására”, valamint „Mérési elrendezés és eljárás folyadékfelszínen úszó szennyeződések kimutatására, elsősorban vízügyi mérőkutakhoz” címmel. Az első *szabadalom hasznosítása* alapján a WESZTA-T Kft. sorozatgyártásba vette a műszert, ami a BKI robbanásbiztos minősítését is megkapta. A próbaüzem a szajoli MOL tározó 6 db megfigyelőkutjaiban jelenleg folyik.

A *mágneses hiszterézis alhurkok mérésén alapuló roncsolásmentes mérés technika* fejlesztése a Universal Network for Magnetic Non-destructive Evaluation keretében folyt. Plasztikusan deformált alacsony széntartalmú acél mintákon, valamint acéllemezek ponthegeztési varratain igazolták, hogy jól nyomon követhető az anyagban bekövetkező degradáció; és hogy ez a módszer a hagyományos eljárásoknál nagyobb érzékenységet biztosít.

A „Logimarker” AKF projekt keretében (Suzuki gépkocsi karosszériaelemeinek azonosító megjelölése a cél) kidolgozták a lézerrel beírt vonalkód kiolvasására alkalmas, hordozható, SMD szerelt elektronikát is tartalmazó integrált mérőfej-prototípus három változatát, amit kalibrációs és referenciamérésekkel teszteltek (METALELEKTRO, BME Jármű Tanszék). Az adott frekvenciájú szinuszos mágneses válaszjel mérésére szoftveres keretrendszer fejlesztettek ki, ami implementált digitális Lock-in erősítő modult, valós idejű megjelenítő interfészt, jelszűrési, detektáló modult, illetve hibafelismerő kódoló/dekódoló egységet tartalmaz. Iparjogvédelmi, licencátadási előkészületek folytak a gyártó Metalelektro Kft-vel. A roncsolásmentes vizsgálati módszer iránt komoly érdeklődés mutatkozik több potenciális felhasználó részéről (GE, Boeing, Uni Reggio di Calabria).

Folytatták a kvantitatív mikroszkópia fejlesztését orvosi, távközlési, és gyártástechnológiai feladatok megoldására.

Az Időkódolásos aszinkron mobil távközlés integrált monitorozási rendszer fejlesztésére (JAP K+F pályázat keretében) biológiai mikroszkópos képek feldolgozása, sejtmag belsejének térképezése, DNS denzitometria és FISH technikával készített minták kvázi valós idejű feldolgozása; az *időkódolási eljárást megvalósító* híd típusú *intelligens szenzor fejlesztése* áramköri tervezése, szimulációja volt a feladat. Neurális hálózati elmélet alkalmazásával időkódolt audió jelekben jellegzetes mintákat azonosítottak, modulrendszerű képfeldolgozó programcsomagot, objektum detektálást, kontúr adatok legkisebb négyzetes közelítését valósították meg harmadfokú spline-okkal.



Felhasználói igények alapján fejlesztették tovább, állították üzembe és tesztelték az Imanqo kábelvég ellenőrző berendezést az AXON Kft. kecskeméti gyárában. Megoldották az adatbázis kezelés módosítását, automatikus kábelstruktúra felismerést normalizált autokorrelációval, és az automatikus adagoló és osztályozó vezérlést.

*Az intézet termelési-vállalkozási tevékenysége*

- Saját fejlesztésű szilícium nitrid kerámia szerszámok kis sorozatú gyártása;
- Speciális felületi akusztikus hullámszűrők (SAW) tervezése és kissorozatú gyártása.

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

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége: Az MFA-ban hat emeritus és négy kinevezett egyetemi tanár (két tanszékvezető), egy docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozik. Vezető munkatársaik zöme oktatott az ELTE, BME, SE, PTE, DE, ME, SZTE, PTEK, PPKE, BMF különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, és doktori és habilitációs tanácsának. Az intézetben működik a veszprémi PE Műszaki Informatikai Kar Nanotechnológia Tanszék Nanoszenzorika Professzori Laboratóriuma és az MFA-ELTE elektronmikroszkópiái közös labor. Külső támogatás nélkül rendszeres gyakorlatokat tartanak preparatív és analitikai laborjaikban a graduális és posztgraduális képzés számára. Intézetükben 2008-ban 21 hallgató folytatta PhD kutatásait. 2008-ben négyen védtek meg PhD munkájukat (mindnyájan summa cum laude minősítéssel).

Részvétel a hazai tudományos közéletben: Az MFA adta az MTA Műszaki Osztály elnökét, a MAB egy albizottsági tagját, a Széchenyi Díj egyik albizottságának egy tagját, az NKTH "Anyagok és nanotechnológia" EU-tanácsadótagját, a Bay ZAKA kuratóriumi tagját, az ELFT főtitkárát és tiszteletbeli elnökét, egy fő MTA doktorképviselőt, egy fő AKT tagot, egy tagot a Matematikai és Természettudományi Kuratóriumban; az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság titkárát és 7 tagját, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság négy tagját, az MTA Anyagtudományi Komplex Biz. négy tagját, az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Bizottság egy tagját, az MTA Orvosi Informatikai Munkabizottság egy tagját, a VEAB Egészségügyi Informatikai Munkabizottság elnökét, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagját, az OTKA Elektrotechnikai és Elektronikai Zsúri egy tagját, az ELFT tanács egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport titkárát, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport vezetőség egy tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat 2. vezetőségi tagját, Magyar Orvosi Laser és Optikai Egyesület vezetőségi tagját, Kémiai és Kohászati Munkabizottság elnökét, az Egészségügyi Telematikai Munkacsoport egy tagját.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok: Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca, MICRON, Nanopages valamint a "The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy", „IEEE Sensors Journal” szerkesztőbizottsági tag, EPS Council tag, E-MRS Council tag, IUPAP C13 Biz. tag, Bohmische Phys. Soc. (USA) Councillor, International Society of Electrocardiology vezetőségi tag, IUVESTA hazai képviselő, IUVESTA Nemz. Bizottság elnök, a vékonyréteg divízió vezetőségi tag, EUROSENSORS International Steering Committee tag, ENIAC Scientific Council tag.

### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet egy munkatársa tagja az EU Priority 3 (Nano and Materials) Programbizottságának és többen rendszeres bírálók az Európai Bizottságnál.

Az intézményekkel való szervezett kapcsolatok 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, Krakow, Wien, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center, stb.) mellett 2008-ban is olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Peugeot-Citroen, Mahle, Rolls-Royce, Renault, GE Hungary, Tateyama, Electronics Oy, VIDEOTON, Weszta-T, stb.

Az MFA stratégiai K+F együttműködési szerződést kötött az Állami Nyomdával. Az MFA a World Forum of Materials Research Institutes tagja. Gyümölcsöző a kutatási-oktatási kapcsolat a Babes-Bolyai Egyetemmel (Kolozsvár) és a Sapientia Egyetemmel.

Az intézet a beszámolási évben három orosz, két-két belga, cseh, szlovák, bolgár, lengyel, és egy-egy ukrán, olasz, román MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápolt. TÉT támogatással két görög, egy-egy spanyol, szlovén, horvát, japán, dél-afrikai, francia és osztrák kapcsolatuk volt, valamint két DAAD-MÖB cserét működtettek. Az egyezményes együttműködés zökkenőmentesen, a KPI által kezelt TÉT továbbra is sok adminisztrációval, és akadozva működik.

A kétoldalú kapcsolatok továbbra is jól működnek, szinte kivétel nélkül közös publikációkat eredményeznek, és nagy segítséget nyújtanak nemzetközi pályázatok előkészítésénél is, tehát feltétlenül hasznosak.

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

### *Hazai pályázatok*

OTKA: A tárgyévben öt új OTKA-pályázatuk nyert támogatást.

NKTH: Az intézet 2 új Jedlik Ányos-pályázatot nyert természetesen magyar ipari partnerekkel együtt, hisz az új pályázatkírási rendszer szerint konzorcium vezetője csak ipari cég lehet.

### *Nemzetközi pályázatok*

A 2008-as év során indult FP7-es pályázatok:

- *High-EF*, Large grained, low stress multi-crystalline silicon thin film solar cells on glass by a novel combined diode laser and solid phase crystallization process
- *CORRAL*, Corrosion protection with perfect atomic layers
- *MORGaN*, Materials for Robust Gallium Nitride
- *NANO\_MAG\_DYE*, MAGNETIC NANOPARTICLES Combined with submicronic bubbles and dye for oncologic imaging

A *RODSOL*, All-inorganic nano-rod based thin-film solar cells on glass (szerződéskötés megtörtént, 2009-ben indul).

Az *ENIAC-JTI* pályázaton *SE2A*, Nanoelectronics for Safe, Fuel Efficient and Environment Friendly Automotive Solutions (a projekt 2009-ben indul).

Az MTA MFA 2008-ban elnyerte az OKM Kármán Tódor-díját, amelyben szerepe volt az MFA Nyári Iskolának.

Négy fiatal kutatójuk szerzett 2008-ban summa cum laude PhD fokozatot. Egy tudományos tanácsadó az SZTE c. Egyetemi tanára lett.

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

1. Tapasztó L, Dobrik G, Lambin P, Biró LP: Tailoring the atomic structure of graphene nanoribbons by scanning tunnelling microscope lithography, *Nature Nanotech* 3: 397-401 (2008) IF: 14,917
2. Koszoró O, Tapasztó L, Markó M, Balazsi C: Characterizing the global dispersion of carbon nanotubes in ceramic matrix nanocomposites, *Applied Physics Letters* 93(20): 201910 (2008) IF: 3,15
3. Németh A, Major C, Fried M, Lábadi Z, Bársony I: Spectroscopic ellipsometry study of transparent conductive ZnO layers for CIGS solar cell applications, *Thin Solid Films* 516: 7016-7020 (2008) IF: 1,693
4. Barna A, Gurbán S, Kótis S, Tóth AL, Menyhard M: Ion mixing at 20 keV: A comparison of the effects of Ga<sup>+</sup>, Ar<sup>+</sup> and CF<sub>4</sub><sup>+</sup> ion irradiation, *Ultramicroscopy* 109(1): 129-132 (2008) IF: 1,996
5. Lábár JL: Electron diffraction based analysis of phase fractions and texture in nanocrystalline thin films, Part I: Principles, *Microscopy and Microanalysis* 14(4): 287-295 (2008) IF: 1,941
6. Süle P: Anisotropy driven ultrafast nanocluster burrowing, *J. Chem. Phys.*, 129 084707-01 - 084707-11 (2008) IF: 3,044
7. Szabó G, Szolnoki A, Borsos I: Self-organizing patterns maintained by competing associations in a six-species predator-prey model, *Physical Review E* 77: 041919/1-041919/6 (2008) IF=2,483
8. Horváth ZJ, Basa P, Jászi T, Pap AE, Dobos L, Pécz B, Tóth L, Szöllösi P, Nagy K: Electrical and memory properties of Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> MIS structures with embedded Si nanocrystals, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 8: 812-817 (2008) IF: 2,19
9. Ódor G, Menyhard N: Crossovers from Parity Conserving to Directed Percolation Universality, *Physical Review E* 78: 041112 (2008) IF: 2,483
10. Volk J, Hakansson A, Miyazaki HT, Nagata T, Shimizu J, Chikyow T: Fully engineered homoepitaxial zinc oxide nanopillar array for near-surface light wave manipulation, *Applied Phys. Lett.* S 92: 183114- (2008) IF: 3,15
11. Szilágyi E, Petrik P, Lohner T, Koós AA, Fried M, Battistig G: Oxidation of SiC investigated by ellipsometry and Rutherford backscattering spectrometry. *Journal of Appl. Phys* 104: 014903 (2008) IF: 2,25
12. Nemes-Incze P, Osváth Z, Kamarás K, Biró LP: Anomalies in thickness measurements of graphene and few layer graphite crystals by tapping mode atomic force microscopy, *Carbon*, 46 1435 – 1442 (2008) IF : 4,260

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	136	Ebből kutató <sup>2</sup> :	78
PhD, kandidátus:	43	MTA doktora:	14
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			24
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			181
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			181
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	1	idegen nyelven:	124
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	2	idegen nyelven:	45
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	218,16	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	1637
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1601
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	4	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	76	posztterek száma <sup>10</sup> :	43
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			45
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát:	6
		PhD-t:	21
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			1363
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			653,2 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	10	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	848,1 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			24,872 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			20
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	79,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			14
NKFP:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	108 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,6 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,4 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	280 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			11
EU-forrásból:	11	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	90,2 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			39
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	107 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## **RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET**

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

Telefon: 483-8302, Fax: 483-8333

e-mail: ppp@renyi.hu, honlap: <http://www.renyi.hu>

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

A Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet a nemzetközi matematikai élet jelentős központja, 2008-ban is megőrizte az évek során kivívott rangját, pozícióját a világ matematikai kutatásainak élvonalában.

Az intézet tevékenysége tíz tudományos osztály keretei között folyik. Mindegyik osztály szoros kapcsolatban áll az általa művelt kutatási területek más vezető központjaival. Ennek köszönhetően kutatási programjukat folyamatosan a matematika fejlődése által felvetett legújabb kérdésekhez igazítják.

Az intézet munkatársai közül 2008-ban két kutató szerzett akadémiai doktori címet. Az év végén 13 akadémikus, 27 akadémiai doktor, 31 kandidátus, illetve PhD címmel rendelkező kutató dolgozott az intézetben. Nagy hangsúlyt fektetnek a fiatal – PhD tanulmányaikat folytató vagy azt éppen befejező – tehetségek bevonására az intézeti kutatómunkába. 2008 folyamán további 4 új fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémiától kapott külön keret terhére. Az intézet kutatói a Közép-Európai Egyetemmel közösen folytatott PhD képzés keretében 5 tanulmányait kezdő és 10 disszertációján dolgozó doktorandusz munkáját irányították. Az utóbbi években kinevezéssel felvett fiatalok mellett, a korábbi években odaítélt, de még le nem járt fiatal kutatói ösztöndíjakat is beszámítva, 2008-ban is mintegy 20 fő ígéretes tudományos kutatói utánpótlás nevelésére volt az intézetnek lehetősége.

Az intézet munkatársai – a megelőző évekhez hasonló számban – 2008 során 163 dolgozatot publikáltak, amelyből 161 tudományos publikáció, 2 pedig ismeretterjesztő. A tudományos publikációk közül 3 szerkesztett mű, 2 akadémiai doktori értekezés, 4 PhD értekezés, 1 könyv, 27 önálló konferencia-kiadványban, 124 pedig referált folyóiratban – egyetlen kivétellel – világnyelveken jelent meg. Ebből a 124-ből 114 külföldi folyóiratban, 10 pedig hazai kerület publikálásra, de a hazai kiadású tudományos folyóiratok közül is 9 nemzetközileg elismert angol nyelvű kiadvány.

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

Az intézet alapító okiratának megfelelően elsősorban matematikai alapkutatásokat végez. Ezek gazdasági-társadalmi haszna ennek megfelelően közvetett, közvetlen gyakorlati alkalmazásuk csak ritkán lehetséges, inkább más tudományterületeken keresztül történik. Mindemellett az *Alkalmazások* alfejezetben alább részletesen kifejtett – elsősorban bioinformatikai és diszkrét matematikai – kutatások olykor már a gyakorlatban is használható eljárásokat, software-eket eredményeztek, ill. eredményeznek.

A kutatások többnyire egyénileg, vagy néhány fős csoportokban zajlottak, változó, de általában számottevő nemzetközi részvétellel. Nehéz meghatározni, hogy hány fős kutatócsoportok érték el az eredményeket, a szám attól függ, milyen mértékben számítjuk ebbe bele a felhasznált, illetve az egyéb ehhez kapcsolódó eredményeket. A pályázati források (OTKA, EU-s pályázatok stb.) jelentősége igen nagy, ez tette lehetővé a szükséges könyvtári, infrastrukturális és egyéb beszerzéseket, a konferenciákon, tanulmányutakon való részvételeket, de összességük meghatározásuk igen esetleges. Általánosságban a pályázati források aránya a felsorolt eredményekben kb. 50 százalékra tehető.

### *Algebra Osztály*

- Az abszolút feloldható csoportok osztályát vizsgálva feltárták ezek kapcsolatát az M-csoportokkal, valamint leírták a minimális nem abszolút feloldható csoportokat.
- Bebizonyították, hogy ha  $A$  véges dimenziós algebra egy 2-nél több elemű véges test felett, akkor az  $A$  egységcsoportja akkor és csak akkor M-csoport, ha  $A$ -nak a Jacobson-radikál szerinti faktora kommutatív, és ez esetben az egységcsoport minden irreducibilis karaktere indukálható az  $A$  egy alkalmas részalgebrája egységcsoportjának valamely lineáris karakteréből.
- Egy véges csoport generálási gráfja színezéssel kapcsolatos numerikus invariánsai között sikerült érdekes összefüggéseket bizonyítaniuk.
- Az algebrai csoportok Helly-dimenziójának végességéről szóló eredményt alkalmazták az invariánselméletben: megmutatták, hogy amennyiben a kétdimenziós általános lineáris csoport affin sokaságok szorzatán hat, akkor véve egy tetszőleges zárt pályán található pontot, annak van olyan, legfeljebb 5 komponensre való vetülete, hogy annak pályája is zárt, és ugyanannyi a dimenziója, mint a kiindulásul tekintett pályának.
- Speiser lemmája szerint amennyiben egy véges csoport szemilineárisan hat egy véges dimenziós vektortéren, akkor a vektorteret kifeszíti a csoport fixpontjainak halmaza. Kimondták és bebizonyították ennek az állításnak lineáris algebrai csoportokra vonatkozó általánosítását. Ezzel új, természetes bizonyítást nyertek egy ekvivaláns vektornyalábok trivialisálhatóságát garantáló állításra, amely alapvető eszköz az úgynevezett racionalitási kérdések vizsgálatában.
- Leírták bizonyos  $2 \times 2$ -es általánosított háromszögmátrix-gyűrűk automorfizmuscsoportját a diagonálisban lévő gyűrűk és a hozzárendelt, egyértelműen meghatározott bimodulus automorfizmuscsoportjainak a segítségével.
- Megmutatták, hogy az aritmetikai varietást generáló véges algebrák kategorikus ekvivalenciája bizonyos inverz monoidok tulajdonságaitól függ, és jelentős haladást tettek ezen monoidok jellemzése felé.
- A félig-Abel-kategóriák alapvetésében megmaradt egyetlen nyitott kérdést megválaszolva megmutatták, hogy az ún. Hofmann-axióma független a többi axiómától.
- Megmutatták, hogy ha két faktorizálható félcsoport erősen Morita-ekvivalens, akkor bármelyiküknek van olyan fedője, amely a másik feletti Rees mátrix félcsoport.
- Kidolgozták kvadratikus operádok verzális deformációelméletét.

### *Algebrai Geometria és Differenciál-topológia Osztály*

- Folytatódtak a Heegaard-Floer homológiai kutatások, melyekben áttörést sikerült elérni az invariánsok kombinatorikus kiszámíthatóságát illetően.

- Szimplektikus topológiát alkalmazva sikerült osztályozni azokat a súlyozott homogén szingularitásokat, melyeknek van olyan simítása, aminek racionális homológiája a 4-dimenziós kör lap homológiájával egyezik meg.
- Kontakt 3-sokaságokban levő Legendre csomók egy, a Heegaard-Floer csoportokban élő invariánsát találták, mely invariánsok különösen jól alkalmazhatók túlcsvart kontakt struktúrákban levő Legendre csomók tanulmányozására.
- Szinguláris leképezések klasszifikáló terei között fennálló fibrálásokra újfajta, szemléletes bizonyítást adtak. Ezt alkalmazni tudták eddig nehezen (és csak másfajta eszközökkel) kezelhető negatív kodimenziós kérdésekre.
- Bal-jobb szinguláris bordizmus csoportokat határoztak meg olyan fold leképezések esetén, amelyekre csak bizonyos multiplicitású többszörös pontok vannak megengedve.
- Splice-quotient szingularitások legfontosabb geometriai tulajdonsága bizonyos görbék, azaz vonalnyalábok bizonyos szeléseinek létezése. Ennek segítségével új bizonyítást adtak a splice-quotient szingularitásokat geometriailag karakterizáló End Curve Theorem-re.
- Nemtriviális példákat konstruáltak Grothendieck szelés-sejtésének alátámasztására: kimutatták olyan legalább 2 nemű görbék létezését a racionális számtest felett, amelynél a fundamentális csoportra vonatkozó homotópia egzakt sorozat lokálisan mindenütt felhasad, ám globálisan nem.
- Schoen véges testek feletti sokaságokra vonatkozó eredményéből levezettek egy kritériumot 1 fokú nulla-ciklusok létezésére véges testek feletti görbék függvénytesteik felett definiált teljes metszet sokaságokon.
- Folytatódott a nemizolált komplex felület-singularitások Milnor fibruma határa topológiájának meghatározására irányuló kutatás. Elkészült egy több mint 50 oldalas kézirat első verziója, melyben egy kombinatorikus algoritmus adja meg a határt műtéti diagram formájában. A szingularitáshoz tartozó monodrómiaikat leíró számos képlet is kidolgozásra került. Külön kiemelendő, hogy az elméleti eredményeket számos példa illusztrálja, hiszen egy-egy ilyen példa kidolgozása, a téma összetettsége miatt, néha bonyodalmas számolást vesz igénybe.
- Három algebrai halmaz tripla metszéseit jellemezték egy algebrai csoporttal, majd geometriai feltételekkel kapcsolták össze.
- Belátták, hogy minden komplex lineáris algebrai csoport Helly dimenziója véges.
- Belátták, hogy a szofikus csoportok bizonyos bővítésekre zártak.

### *Algebrai Logika Osztály*

- Az elsőrendű logika ún. korlátos szeletét és a parciális modelleket korábban definiálták és mindkettő nagyon hasznosnak bizonyult az elsőrendű logika eldönthető szeleteinek feltérképezésében és kiszámíthatóságelméleti alkalmazásában. Most definiáltak egy aránylag egyszerű fordítófüggvényt a korlátos szeletből az elsőrendű formulák közé és bizonyították, hogy egy korlátos formula pontosan akkor érvényes, ha a lefordítottja érvényes az összes parciális modellben.
- Megmutatták, hogy a speciális relativitáselméletben a tömegközéppont fogalma nem értelmezhető a legtöbb esetben. Például ha két test (tömegpont) életútja kitérő, akkor nincs olyan életút, melyet minden megfigyelő tömegközéppontként értelmezhet (semmilyen, akár megfigyelőtől függő tömegeloszlás esetén sem).
- Megmutatták, hogy ha egy végtelen dimenziós cilindrikus algebra diagonálmentes része reprezentálható, akkor úgy is reprezentálható, hogy a diagonális elemek az „igazi” diagonális konstansokat tartalmazzák.

### *Analízis Osztály*

- Vizsgálták a Markov egyenlőtlenséget  $k$ -monoton polinomok esetére. Az újonnan bevezetett kvázi-pozitív interpolációs kvadratúrák segítségével belátták Fejér Lipót és Szegő Gábor tételeinek általánosítását.
- Kiderült, hogy milyen feltételek kelljenek ahhoz, hogy egy sémák közti morfizmus generikusan standard legyen, ahol maga ez a standardtság is új fogalom.
- A néhány éve bevezetett részalgebrák komplementaritására több eredmény született, például ilyen részalgebrák konstrukciója és alkalmazása információcsatornákra.
- Bebizonyították, hogy ha egy síkon adott Borel leképezés nem növeli semelyik Borel-halmaz lineáris (Hausdorff-) mértékét, akkor nem növeli semelyik Borel-halmaz Lebesgue-mértékét sem. Ehhez kapcsolódóan megmutatták, hogy a  $[0,1]$  intervallumon a Hausdorff-mértékek nem Borel-izomorfak a kétszeresükkel.
- Halmazok összegének számosságára vonatkozó egyenlőtlenségeket bizonyítottak kommutatív csoportokban, Plünnecke egyenlőtlenségére támaszkodva, illetve azt általánosítva.
- Vizsgálták a nemnegatív, pozitív-definit függvények osztálya által alkotott kúp extrémális eleit, és Choquet reprezentációval előállítottak nem-extremális elemeket.

### *Diszkrét Matematika Osztály*

- Turán-típusú tételeket bizonyítottak általánosítva Mantel tételét 4-uniform hipergráfokra.
- Felső korlátot igazoltak gráf és komplementere first-fit kromatikus számának összegére.
- Aszimptotikusan meghatározták ötszögmentes gráfokban a háromszögek maximális számát.
- Unió feltételeket kielégítő halmazrendszerek méretére vonatkozó felső korlátokat bizonyítottak.
- Az adatbázisok elmélete és a kódelmélet határára eső 01-mátrixokról szóló extrémális tételeket bizonyítottak.
- Négyrészes gráfok egyenletes színezésére vonatkozó tételt bizonyítottak, általánosítva ezzel a korábbi klasszikus eredményeket.
- Belátták Dirac Hamilton-körökre vonatkozó tételének általánosítását  $k$ -uniform hipergráfokra.
- Újabb tételekkel egészítették ki az általánosított véletlen gráfok elméletét.
- Matematikai logikai eszközök (ultraszorzat) segítségével bebizonyították a hipergráf regularitási lemma egy erős változatát.
- Konvex halmazokat adott arányban metsző hipersíkok létezéséről szóló tételt bizonyítottak, majd általánosították azt mértékekre is.
- Különböző nempáros gráfokra bebizonyították, hogy az azt nem tartalmazó nagy minimális fokú gráfok lényegében párosak.
- Véges gráfok gyengén konvergens sorozatainak spektrálmélete segítségével aminábilis és egyéb speciális gráfok tulajdonságait határozták meg.

### *Geometria Osztály*

- A térfogatszorzatra vonatkozó Blaschke-Santaló egyenlőtlenség stabilitását igazolták. Hasonló módszerrel más affin invariáns egyenlőtlenségek stabilitását is igazolták, mint például az affin izoperimetrikus egyenlőtlenségét.



- Konvex testbe beírt véletlen poliéder és a konvex test  $j$ -dik átlagszélessége különbségének aszimptotikájára adtak formulát, ha  $j$  tetszőleges, a dimenziónál kisebb szám.
- Egy  $G$  gráf metszési száma az él-metszések minimális száma  $G$  összes lerajzolására. A pár-metszési szám a metsző élpárok minimális száma, a páratlan metszési szám pedig az egymást páratlan sokszor metsző élpárok minimális száma. A három metszési szám között nyilvánvaló egyenlőtlenségek teljesülnek: közülük a páratlan metszési szám a legkisebb és a (hagyományos) metszési szám a legnagyobb. A korábban ismert legjobb konstrukciópéldán javítva konstruáltak olyan gráfokat, amelyek pár-metszési száma a metszési szám konstansszorososa. Ez választ ad Tutte egy régi kérdésére. Azt is belátták, hogy ha  $G$  pár-metszési száma  $k$ , akkor (hagyományos) metszési száma legfeljebb  $O(k^2/\log^2 k)$ .
- Olyan diszjunkt konvex halmazokból álló rendszert konstruáltak, amelyben bármelyik hármasnak egyértelmű irányítása van, de nem létezik olyan ponthalmaz, hogy a megfelelő hármasoknak megegyezik az irányítása. Más szóval a konstruált halmazrendszert nem lehet pontokkal reprezentálni. A legnagyobb reprezentálható részhalmaz méretére felső becslést adtak.
- Ismeretes hogy  $n$  általános helyzetű pont legalább  $cn^2$  üres háromszöget határoz meg és ez a korlát nagyságrendileg nem javítható. Belátták, hogy ha a pontokat két színnel színezzük, akkor is meghatároznak legalább  $cn^{4/3}$  üres háromszöget, amelynek egyszínűek a csúcsai.
- Szférikus és hiperbolikus térre kiterjesztették korábbi gömbkarakterizációjukat: ha két konvex test bármely kongruens példányainak metszete centrálszimmetrikus, akkor azok kongruens gömbök.
- Topologikus terekre vizsgálták a regulárisan zárt halmazok egy általánosítását.
- A korábban ismerteknél jobb becslést adtak inkongruens körökből álló rétegek permeabilitására.
- Részeredményeket értek el Littlewood egy 1968-ból származó, egymást kölcsönösen érintő hengerek számára vonatkozó kérdésével kapcsolatban.

### *Halmazelmélet és Topológia Osztály*

- Bevezettek egy új típusú tükrözési elvet, amely az  $R$ -axiómánál lényegesen gyengébb, mégis implikálja annak számos következményét. Módszereik – bizonyos változtatásokkal – ZFC-beli eredményeket is adnak, pl. azt, hogy ha egy lokálisan szeparábilis és megszámlálhatóan szűk tér szinguláris számosságú és minden kisebb számosságú altere metrizálható, akkor az egész tér is az.
- Egy igen összetett forszolási eljárással első megszámlálható, lokálisan kompakt, iniciálisan  $\omega_1$ -kompakt, de nem kompakt térre adtak konzisztens példát. Az így kapott tér egy-pontos kompaktifikációja az első és egyetlen ismert példa olyan kompaktumra, melynek konvergencia spektruma kihagyja  $\omega_1$ -et.
- Folytatták lokálisan kompakt szétszórt terek számosságssorozatának a vizsgálatát. Belátták, hogy sok esetben van „univerzális” ilyen tér, amelynek alterei az összes lehetséges ilyen számosságssorozatot megadják.
- Pontos képletekkel leírták a kétváltozós folytonos merev függvényeket, melyekről kiderült, hogy három függvényosztályt alkotnak.
- Belátták, hogy az  $I_p$ -terek által indukáltakkal összehasonlítható Borel ekvivalencia relációk közötti Borel redukciós hierarchia sokkal bonyolultabb, mint ahogy azt várták.

- Konzisztens pozitív választ adtak egy Baire  $\alpha$  osztályú függvények differenciátulajdonságával kapcsolatos kérdésre. Bizonyos további definiálhatósági feltételek esetén a pozitív válasz már ZFC-ben is igaz.
- Egy – általuk korábban publikált – kompakt halmazokból álló szigma-ideálról megmutatták, hogy ellenpéldát ad a témakör számos további fontos nyitott kérdésére is.
- Ismert, hogy egy  $\aleph_0$ -kategorikus és  $\aleph_0$ -stabil struktúra elméletének bármely véges részhalmaza igaz marad valamely véges részstruktúrában. Ezt a tételt sikerült gyengébb stabilitási feltételeknek eleget tevő struktúrákra kiterjeszteni.

### *Információelmélet Osztály*

- Vizsgálták több bemenetű csatornák titkossági kapacitását, számos esetre meghatározták ennek pontos értékét.
- Új eredményeket bizonyítottak általános entrópia-funkcionálok és Bregman-távolságok minimalizálásáról.
- Javították az  $n$ -dimenziós Gibbs eloszlásra vonatkozó relatív entrópiának a lokális specifikációkra vonatkozó feltételes relatív entrópiákkal való becslését.
- Vizsgálták irányított gráfok irányított lokális kromatikus számának viselkedését. Igazolták, hogy általános esetben ez tetszőlegesen nagy mértékben különbözhet a megfelelő irányítatlan gráf lokális kromatikus számától, de a gráfok egy fontos osztályára már nem különbözik.
- Általánosították egy felületháromszögelések kromatikus számára vonatkozó tételt lokális kromatikus számra.

### *Számelmélet Osztály*

- Külföldi társszerzőkkel bebizonyították, hogy az egymást követő prímek különbségei között végtelen sokszor előfordulnak olyanok, amelyek lényegében az átlagos különbségek négyzetgyökénél is kisebbek, a pontosan 2 prímfaktorból álló számok között pedig már végtelen sokszor előfordul legfeljebb 6 különbség.
- Vizsgálták az elliptikus függvényekkel történő interpolációt, vagyis hogy a tóruszon néhány pontban megadott értékeket mekkora rendű elliptikus függvénnyel lehet interpolálni.
- Folytatták vizsgálataikat automorf  $L$ -függvények méretével kapcsolatban. 2008-ban megkezdték a klasszikus moduláris  $L$ -függvények spektrális átlagolásának kiterjesztését a számtestek feletti  $L$ -függvényekre.
- Megoldották az idempotens polinomok koncentrációjára vonatkozó több kérdést, megcáfolva egy közismert sejtést.
- Leírták többdimenziós wavelet bázis konstruálásához dilatációnak felhasználható önadjungált expanzív mátrixok ekvivalenciáját.
- A pozitív és pozitív definit függvények konvex kúpjában új extrém elemeket konstruáltak és ezzel több sejtést megcáfoltak.
- Belátták, hogy a többváltozós polinomokra vonatkozó Bernstein-egyenlőtlenség szempontjából kapható becslések vonatkozásában tetszőleges konvex testeken is ekvivalens a beírt ellipszis módszer és a pluripotenciálméleti módszer.
- Leírták általánosított Sidon halmazok maximális nagyságrendjét intervallumokban és maradékosztályokban.

- Leírták, hogy többdimenziós véges ponthalmazra hogyan viselkedik a halmaz és határpontjainak összeshalmaza.

### *Valószínűségszámítás és Statisztika Osztály*

- Yakov Grigorevich Sinai 1981-ből származó kérdésére válaszolva megmutatták, hogy a síkbeli periodikus Lorentz folyamat lokális perturbációi esetén a részecske diffúziós limesze Brown mozgás.
- Erős invarianciát bizonyítottak tranziens nearest neighbour Markov lánc és Bessel folyamat között. A Markov lánc átmenet valószínűségének segítségével kritériumot adtak arra, hogy mikor van véges, illetve végtelen sok elválasztó pont.
- Sikert a bolyongás lokális idejét approximálni egy Brownian sheet-tel, ami kombinálva van egy tőle független Brown mozgással.
- Új becsléseket dolgoztak ki függvényosztályok maximumára abban az esetben, ha az U-statisztika szórásnégyzetén kívül más alkalmas mennyiségeket is ismerünk.
- Új keverési feltételt adtak stacionárius folyamatokra és alkalmazták azt empirikus folyamatokra.
- Megoldották Mark Kac egy 1946-ból származó problémáját, centrális határeloszlás tételt bizonyítottak véletlen frekvenciájú összegekre.
- Többszemponú nem paraméteres szórásanalízist dolgoztak ki.
- Nem Gauss típusú határeloszlástételeket igazoltak véges halmazokból való mintavételre, és ezt alkalmazták bootstrap és permutációstatisztikák viselkedésének elemzésére végtelen szórású változókra.
- Javították a véletlen vektorokra vonatkozó logaritmikus Sobolev egyenlőtlenség konstansát.
- Új becslési eljárást dolgoztak ki a rosszindulatú daganatos betegek túlélésére, egyesítették a Cox-regresszió- és a gyorsított idejű modelleket.

### *Alkalmazások*

A Rényi Intézetben továbbra is elsősorban elméleti alapkutatások folynak; az egyre szűkülő költségvetési támogatás e hagyományosan magas szintű kutatások fedezetére csak szűkös keretet biztosít.

Az akadémiai *Elnöki keret* számos alkalmazott kutatás elindításához, illetve folytatásához adott már lendületet. 2008-ban a 13,4 milliós beruházási támogatás a bioinformatikai kutatások technikai hátteréhez jelentett alapvető fontosságú támogatást.

Az intézetben folyó bioinformatikai kutatások többek közt a genom-átrendeződések tanulmányozására, szekvencia-illesztések és evolúciós törzsfák kapcsolatának vizsgálatára irányultak, új statisztikai módszereket dolgoztak ki, amelyek nemcsak filogenetikai, hanem biológiai szempontból is fontosak. A kialakított módszerek segítségével gyakorlatban közvetlenül használható software csomagot is kifejlesztettek.

A nagy hálózatok jelentősége és vizsgálata a világháló, hatalmas kommunikációs hálózatok vagy a parányi mikrochipeken található – szintén óriási méretű – gráfok elmélete betört a tudomány más területeire is, elég csak a Mindentudás Egyeteme korábbi előadásaira utalni, ahol a biofizika, illetve elméleti fizika kiválóságai is teljes előadásukkal erre a kérdésre

irányították a figyelmet. A téma kutatásában a Microsoft és az ELTE matematikusaival karöltve a Rényi Intézet munkatársai egyre növekvő számban vesznek részt, és újabb alapvető fontosságú tételeket bizonyítottak. Ezen kívül gyakorlati célú kutatásokat végeztek a nagy hálózatokban található különböző részstruktúrák detektálására, amit a rendelkezésre álló hálózat adataiban levő hibák (téves információk, rögzítési hibák) tettek különösen nehezzé. Ezek a vizsgálatok két fontos témát kapcsolnak össze: a nagy hálózatok elméletét és a hatékony tudásmenedzsment kialakítására irányuló abszolút gyakorlati kutatásokat.

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

#### *Kapcsolatok felsőoktatási intézményekkel*

Az intézet kutatói számos budapesti és néhány vidéki felsőoktatási intézmény (pl. ELTE, BME, Debreceni Egyetem) munkájában vettek részt állandó oktatóként, különösen nagy részt vállaltak a felsőbb éves matematikus, illetve fizikus hallgatók és doktoranduszok részére tartott előadások tartásában. Az intézet és a Közép-Európai Egyetem (CEU) közös, angol nyelvű matematikus PhD programja (PhD in Mathematics and its Applications) hatodik évébe lépett. Jelenleg 5 PhD tanulmányait kezdő és 12 disszertáció írásán dolgozó hallgatója van a tanszéknek. A program tanárait, azaz a CEU Matematika Tanszékének tagjait az együttműködés keretében továbbra is nagyobb részt az intézet adja, munkatársai a két félév folyamán 15 kurzust oktattak. A CEU és az egyéb egyetemek hallgatóit számba véve 2008-ban intézeti témavezető irányításával 31 PhD hallgató, 19 szakdolgozó (MSc) és 5 tudományos ösztöndíjas dolgozott, egy pedig TDK dolgozatot írt. Az intézet dolgozói közül kerül ki a Budapest Semesters in Mathematics – főleg amerikai diákok részére szervezett angol nyelvű matematikus részképzési program – tanárainak többsége is. 2008-ban az intézet 34 munkatársa, a kutatók 50%-a oktatott valamelyik hazai felsőoktatási intézményben. Az intézet kutatói által 2008-ban tartott egyetemi tanórák száma meghaladta a 4300-at.

Az intézet a korábbi hagyományokat folytatva 2008-ban is fogadott két egyetemi kollégát vendégkutatóként. Kiválasztásukban jelentős szerepet játszott, hogy témájuk kapcsolódjon az intézet kutatási profiljához.

#### *Hazai kapcsolatok*

Folytatódtak az intézeti kutatócsoportok heti rendszerességű szakmai szemináriumai, melyek többsége túlmutat az intézet keretein, az egész hazai matematikai kutatás fő irányaira igen jelentős hatással vannak.

Az intézet kutatói a matematikai közéleti feladatok vállalásából hagyományosan jóval számarányukon felül veszik ki részüket. A jelentősebb tisztségek közé tartoznak az MTA Jelölőbizottságában, az MTA Matematikai Osztályában, ennek bizottságaiban, az AKT-ban és a Matematikai és Természettudományi Kuratóriumban, az OTKA bizottságaiban, a Magyar Akkreditációs Bizottságban, a Bolyai János Matematikai Társulat választmányában és ezen keresztül a MTESZ-ben való részvétel. A Bolyai János Matematikai Társulat elnöke, a Bolyai Kutatási Ösztöndíj Kuratórium elnöke, az MTA Matematikai Bizottság elnöke és titkára, a Matematika Doktori Bizottság elnöke és alelnöke, a CEU Doktori Bizottság elnöke és

alelnöke, az OTKA Matematika Zsűri elnöke, valamint a Magyar Akkreditációs Bizottság Matematika Képzési ági Bizottság elnöke valamennyien az intézet kutatói.

Kiemelendő, hogy a nagy hálózatokra vonatkozó kutatások gyakorlati jelentősége folytán erősödtek az intézet ipari kapcsolatai olyan cégekkel, mint pl. a Montana Zrt.

### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézet kutatói hagyományosan nagyon széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Az együttműködés elsősorban közös publikációkban, kétirányú látogatásokban, közös projektekben, konferenciák közös szervezésében nyilvánult meg. Az intézet munkatársai 2008-ban 17 nemzetközi konferencia vagy workshop szervezésében vettek részt, melyek közül nyolcnak maga a Rényi Intézet adott helyet. Ezek az együttműködések általában nem igényeltek intézményes formát, ugyanakkor eredményességüket mutatja például a nagy számú közös cikk.

Mind az MTA kétoldalú egyezményes, mind a TÉT kapcsolatok keretében megvalósult utazások eredményesen szolgálták a tudományos együttműködést, keretükben eredményes közös kutatások folynak, hasznos információcserére és időnként konferenciárészvételre nyílik lehetőség.

Az intézet kutatói 2008-ban 4 nemzetközi tudományos bizottsági tagságot, 92 nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagságot mondhatnak magukénak, 232 előadást tartottak nemzetközi konferenciákon, sokat közülük meghívott, illetve plenáris előadóként.

2008-ban az intézet öt EU-s pályázat keretében 28 vendégkutatót látott vendégül, összesen 62 hónapra. Ugyanakkor az Európán kívüli országokból, de részben Európából is érkeztek vendégeik más forrásokból (Fulbright, TÉT, OTKA, akadémiai csere, és egyre nagyobb mértékben az intézettől független, a látogató által szervezett forrásból) finanszírozott látogatások keretében is. Az intézet matematikus látogatóinak száma 2008-ban – konferencián résztvevőket nem is számítva – meghaladta a félszázat.

A teljesen vagy részben az intézet által szervezett nemzetközi tudományos tanácskozások időrendi sorrendben az alábbiak voltak:

- *Seminar Sophus Lie*, 2008. március 27-29.
- *Bayesian Phylogeny Workshop*, 2008. június 25-29.
- *Intuitive Geometry*, 2008. június 30-július 4.
- *Discrete and Convex Geometry Workshop*, 2008. július 4-6.
- *7th Summer School in Potential Theory (Baja)*, 2008. június 29-július 6.
- *Conference on Approximation Theory*, 2008. július 6-12.
- *Building Bridges, Honouring the 60th birthday of Laci Lovász*, 2008. augusztus 5-9.
- *Fete of Combinatorics and Computer Science (Keszthely)*, 2008. augusztus 11-15.
- *Information and Communication*, 2008. augusztus 25-28.
- *3-manifolds and Contact Topology*, 2008. szeptember 26-28.
- *Deformations of Surfaces*, 2008. október 10-12.
- *Mini-Workshop on Quantum Statistics*, 2008. december 12.

Ezek közül kiemelkedik a Lovász László 60. születésnapja alkalmából rendezett *Building Bridges* konferencia 165 külföldi és 85 magyar matematikus részvételével, és az ennek folytatásaként szervezett *Fete of Combinatorics and Computer Science* 126 külföldi és 59 magyar résztvevővel.

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

##### *Hazai pályázatok*

Az intézeti kutatócsoportok a korábbi évekhez hasonlóan jól szerepeltek a hazai OTKA-pályázatokon, az ezen projektekből származó összbevétel meghaladta a korábbi évek bevételeit, és továbbra is elmondható, hogy az intézet kutatói szinte kivétel nélkül résztvevői különböző OTKA projekteknek.

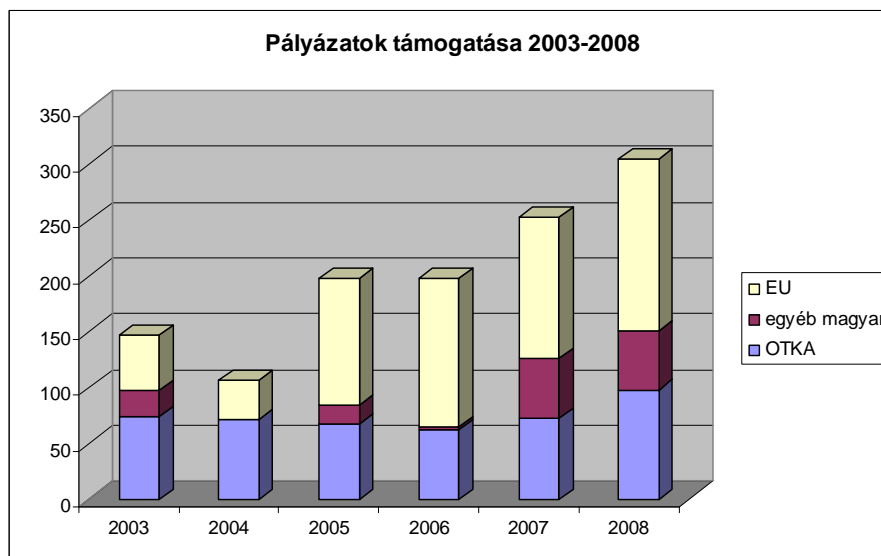
Továbbra sincsenek az egyes OTKA felhívásokon kívül olyan lényeges hazai pályázati lehetőségek, amelyekre matematikai alapkutatási projektekkel pályázni lehetne. Ezért különösen értékes, hogy 2007-ben a Montana Zrt. vezette konzorcium tagjaként sikeresen pályáztak egy NKTH kiírás szerinti Jedlik projektre, melynek keretében a kutatásokat 2007 végén csak elkezdték, azok alapvetően 2008-ban zajlottak. Az intézet – profiljának megfelelően – elsősorban elméleti kutatásokat folytatott. Hatékony tudásmenedzsmenti eszközöket fejlesztettek ki, mindenek előtt a nagy gráfok különböző paramétereit, részstruktúráit vizsgálták, illetve azok meghatározására konkrét algoritmusokat dolgoztak ki. A projekt 2008. december 31-én záródott.

##### *Nemzetközi pályázatok*

Az intézetben a kutatói mobilitás ebben az évtizedben eleinte a Centre of Excellence, később a számos elnyert, főleg 2004-ben és 2005-ben induló ún. Transfer of Knowledge EU-s projektek (FP5 és FP6) eredményeként örvendetesen megnövekedett. Ezek a projektek az intézeti kutatások finanszírozásához jelentősen hozzájárultak, illetve hozzájárulnak. A projektek támogatásával hosszabb távra érkező nemzetközi rangú tudósok eredményesen vettek részt az intézeti kutatásokban, előadásaikkal, konzultációikkal új nemzetközi távlatokat, együttműködési lehetőségeket nyitottak meg, és természetesen tovább öregbítették az intézet hírnevét. Ezen projektek közül kettő 2008-ban járt le, egy pedig 2009-ben fog lejárni (az utolsó, bioinformatikai témájú projekt 2010-ig tart). Sajnálatos módon a 7. Keretprogramban az ilyen típusú mobilitási pályázatok megszűntek, általában a mobilitási pályázatok közül az egyéniek kerültek előtérbe és általában is csökkent, legalábbis a szorosán vett kutatás-fejlesztési pályázatok között az alapkutatások támogatottsága. Új típusú pályázati elemként jelent meg azonban az ugyancsak újonnan létrehozott European Research Council ún. „Advanced Grant”-je, mely alapvetően a tapasztalt tudós vezetésével létrehozott kis kutatói csoportos kutatások segítségét célozza meg hosszabb távra és jelentősebb, projektenként több millió eurós támogatással. Ennek megfelelően viszonylag kevés projektet támogatnak és igen nagy a verseny. Az intézet jelentős sikerének könyvelhető el, hogy a 2008. évi pályázati fordulóban a természettudományok és matematika kategóriában összesen két magyar nyertes közül az egyik a Rényi Intézet kutatóprofesszora által vezetett és annak további munkatársait magába foglaló csapat „Gaps between primes and almost primes. Pattern in primes and almost primes. Approximations to the twin prime and Goldbach

conjecture” című pályázata volt, melyet összességében 5 évre 1.376.400 euróval támogat az ERC. Megjegyezzük, hogy a kategória másik nyertes magyar pályázata is matematikai témájú volt.

Az elnyert hazai és nemzetközi pályázatok eredményeként, mint azt az alábbi diagram mutatja, 2008-ban is folytatódott a korábbi évek tendenciája. Összességében is, és minden részében is tovább növekedtek az intézet pályázati bevételei a korábbi évekhez képest. Összességében meghaladták a 300 millió forintos szintet, mely így elérte az közvetlen akadémiai támogatások 60%-át, ill. az intézet 2008. évi összbevételének közel 40%-át.



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

1. Bárány I: Random points and lattice points in convex bodies, Bulletin of the American Mathematical Society 45(3): 339-365 (2008)
2. Böröczky KJ, Schneider R: A characterization of the duality mapping for convex bodies, Geometric and Functional Analysis 18(3): 657-667 (2008)
3. Csiszár I, Matus F: Generalized maximum likelihood estimates for exponential families, Probability Theory and Related Fields 141(1-2): 213-246 (2008)
4. Elek G:  $L^2$ -spectral invariants and convergent sequences of finite graphs, Journal of Functional Analysis 254(10): 2667-2689 (2008)
5. Blomer V, Harcos G: The spectral decomposition of shifted convolution sums, Duke Mathematical Journal 144(2): 321-339 (2008)
6. Juhász I, Soukup L, Szentmiklóssy Z: Resolvability and monotone normality, Israel Journal of Mathematics 166(1): 1-16 (2008)
7. Máthé A: Hausdorff measures of different dimensions are not Borel isomorphic, Israel Journal of Mathematics 164(1): 285-302 (2008)

8. Matolcsi M, Szöllősi F: Towards a classification of 6 x 6 complex Hadamard matrices, *Open Systems and Information Dynamics* 15(2): 93-108 (2008)
9. Darling AE, Miklós I, Ragan MA: Dynamics of genome rearrangement in bacterial populations, *Plos Genetics* 4(7): e1000128 (2008)
10. Fehér LM, Némethi A, Rimányi R: The degree of the discriminant of irreducible representations, *Journal of Algebraic Geometry* 17(4): 751-780 (2008)
11. Fox J, Pach J: Separator theorems and Turán-type results for planar intersection graphs, *Advances in Mathematics* 219(3): 1070-1080 (2008)
12. Hiai F, Mosonyi M, Ohno H, Petz D: Free energy density for mean field perturbation of states of a one dimensional spin chain, *Reviews in Mathematical Physics* 20(3): 335-365 (2008)
13. Harari D, Szamuely T: Local-global principles for 1-motives, *Duke Mathematical Journal* 143(3): 531-557 (2008)
14. Rödl V, Rucinski A, Szemerédi E: An approximate Dirac-type theorem for  $k$ -uniform hypergraphs, *Combinatorica* 28(2): 229-260 (2008)
15. Borgs C, Chayes JT, Lovász L, T.Sós V, Vesztegombi K: Convergent sequences of dense graphs I: Subgraph frequencies, metric properties and testing, *Advances in Mathematics* 219(6): 1801-1851 (2008)
16. Weiner M: Restricting positive energy representations of  $\text{Diff}^+(S^1)$  to the stabilizer of  $n$  points, *Communications in Mathematical Physics* 277(2): 555-571 (2008)



## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	91	Ebből kutató <sup>2</sup> :	68
PhD, kandidátus:	31	MTA doktora:	25
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	5
		rendes tag:	6
			17
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			163
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			161
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	105
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1	idegen nyelven:	45
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	94,708	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	1316
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			989
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	4	MTA doktora:	2
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	232	posztterek száma <sup>10</sup> :	1
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	92
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			34
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	19
		PhD-t:	31
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			4348
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			479 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	11	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	347 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			22
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	98 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	54 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			8
EU-forrásból:	8	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	154 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	41 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

1111 Budapest, Kende u. 13-17,  
Telefon: 279-6000, Fax: 466-7503  
e-mail: sztaki@sztaki.hu, honlap: www.sztaki.hu

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

Az MTA SZTAKI a tágan értelmezett informatika tudományának műhelye, az információtechnológia, számítástudomány és rokonterületei nemzeti kutatóbázisa. Elsősorban az informatika műszaki-tudományos és matematikai kérdéseivel foglalkozik, de figyelme kiterjed mindazon területre, amelyek ezekkel az alapkérdésekkel kapcsolatban állnak, azoknak ösztönzést, diszciplináris alapokat kölcsönözhetnek. Az alap- és alkalmazott kutatás széleskörű művelése mellett fontos feladat a megszerzett speciális ismeretek hasznosítása a kutatás-fejlesztés, rendszertervezés és rendszerintegrálás, tanácsadás, szoftverfejlesztés területén.

Az intézet által művelt matematikai és mérnöki irányultságú alapkutatási tevékenység adja meg azt a többször bizonyított képességet, hogy szinte azonnal képesek – sokszor proaktív módon – reagálni az informatikai forradalom által szinte naponta hozott újabb és újabb kihívásokra. Csak néhányat kiemelve: érzékelő számítógépek és távjelenlét, új típusú ember-gép kapcsolatok, bio-computing, molekuláris számítástudomány, komplex rendszerek modellezése, irányítása, felügyelete és diagnosztikája, elosztott számítási architektúrák, Grid-rendszerek, nagysebességű hálózatok és biztonsági kérdéseik, mobil kommunikáció, új WWW-technológiák, mérnöki visszafejtés, globalizált vállalatok informatikája, elektronikus kereskedelem, ágens-alapú struktúrák, minőségbiztosítás, pénzügyi menedzsment és kockázatanalízis, környezeti modellezés, eGovernment, de a sort folytathatnánk tovább. A felgyorsult világ bizonyos területeken a múltban megszokottól sokszor eltérő kutatási attitűdöt, szervezettséget és ezek kapcsán az eredmények másfajta értékelését követeli meg.

*A nemzetközi mércével mérhető alapkutatási eredményekre építik az itthon és külföldön is hasznosítható informatikai fejlesztéseket és a magas szintű tanácsadási tevékenységet, egy olyan kiválósági központot megcélözva, mely vonzó témákat és körülményeket biztosít a tehetséges fiatalok Ph.D. tanulmányához, alkotó tevékenységük megkezdéséhez.*

2008-ra kutatási kapacitásuk és portfóliójuk áttekintését, a szükségessé váló módosítások elvégzését (beleértve új kutatócsoportok megalakítását, korábbiak esetleges átalakítását, megszüntetését), valamint a hazai és nemzetközi jelenlétük és kisugárzásuk további növelését irányozták elő. A magas szintű tudományos eredmények elérése és publikálása, mint alapkövetelmény mellett különös figyelmet kívántak az eredmények hasznosíthatóságára, hasznosítására fordítani:

- A futó EU-s projektek sikeres folytatása, illetve lezárása; magas szintű eredményesség a VII. Keretprogram újabb pályázati fordulóiban.
- A nagyobb méretű, interdiszciplináris K+F projektek végzéséhez szükséges kapacitás elérése érdekében virtuális intézetek, virtuális laboratóriumok kialakítása és működtetése, mind hazai, mind nemzetközi téren.

- Jelenlétük erősítése, új partnerek megnyerése kutatás-fejlesztési, tanácsadási munkák végzésére olyan kiemelt hazai cégekkel, mint a Paksi Atomerőmű Rt, General Electric, Audi, IBM, Knorr Bremse, MOL, Magyar Telekom, Bosch, és más sikeres, feltörekvő vállalkozásokkal.
- Szerződéses kutatás-fejlesztési együttműködések előkészítése és kialakítása Európán kívüli (elsősorban USA-beli és Japán) intézetekkel és cégekkel.

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

### *Matematika és számítástudomány*

Kombinatorikus számítástudomány, gráfelmélet: Megadták a teljes leírását egy adott gráfosztályra a gráfosztály által öröklődően dominált gráfoknak. Megvizsgálták, hogy egyes dominanciatételek, amelyek véges gráfokra érvényesek, mikor maradnak érvényesek végtelen gráfokban. Minimax tételt bizonyítottak egy paraméterre, amely gráfok hipergráfokkal történő reprezentációjából származik. Bebizonyították, hogy a véletlen gráfban 1-hez tartó valószínűséggel a csúcsoknak közelítőleg a felére teljesül, hogy a foka legfeljebb akkora, mint a szomszédainak átlagfoka. Új módszert adtak többprocesszoros ütemezési problémák hatékonysági elemzésére. Eredményeket értek el élszínezett gráfokban található maximális „tarka” struktúrák meghatározásában.

Adatbányászat és Web-keresés terén az extrém méretű mátrixokon történő szinguláris felbontással kapcsolatos kutatásaik új eredménye, hogy a *klaszterezés* nehézségét a sok kisszámú sűrű közösség és az ezeket összekötő nyúlványok jelenlétére vezették vissza és a híres Barabási, Watts-Strogatz és Kleinberg *hálózatmodelleket kiterjesztő* olyan modellt adtak, amely megmagyarázza a sűrű közösségek és nyúlványok létrejöttét. Az *információkereső, rangsoroló* eljárások minőségének tekintetében jelentősen továbbfejlesztették képi információkereső rendszerüket. A rendszer magába integrálja mind a képi, mind a természetes szöveg alapú módszereket és többek között tartalmazza a képi szegmentáció és feature szelekció hatékony implementációját.

Az algebrai kutatások terén több eredményük kötődik a véges csoportok elméletéhez, és kapcsolódásához a számítások világával. Új strukturális eredményeket értek el ezen a téren az olyan általánosított sokszögek vizsgálatában, amelyek automorfizmus-csoportja primitív. Polinomidejű kvantum-algoritmust sikerült találniuk a rejtett részcsoporthoz kapcsolódó fontos statisztikus jellegű döntési problémára. Egy érdekes algebrai számítási probléma merül itt fel: gyorsan kell olyan pontot találni egy véges testek feletti lineáris térben, amely nincs rajta egyetlen megadott hipersíkon sem.

A biológiai motivációjú számítástudományi kutatásaik során létrehoztak egy olyan általános fogalmi keretet, amely egységes formában teszi lehetővé a membrán automaták (P automaták) egyes variánsai és a rájuk vonatkozó matematikai eredmények tárgyalását. A P rendszerek (membrán rendszerek) az élő sejt felépítése és működése által inspirált osztott számítási modellek, a P automaták pedig olyan, a P rendszereken alapuló számítási eszközök, melyek ötvözik a klasszikus automaták és a környezetükkel folyamatos kölcsönhatásban lévő természetes rendszerek egyes jellemzőit. Az eddig ismert eredmények szignifikáns

erősítéseként megmutatták továbbá, hogy a genom fejlődése által motivált elemi műveletekre (szimbólum beszúrása, törlése, helyettesítése) épített rendkívül egyszerű nyelvprocesszorok (általános értelemben vett grammatikák) együttese már egészen minimális számú komponens (7) esetében is a Turing géppel egyenlő erejű nyelvfelismerő eszközt képviselnek. Az elért eredmények további bizonyítékait adják annak, hogy az élő szervezetek működését és felépítését utánozó, viszonylag egyszerű modellekből hatékony, nagy számítási erejű, a hagyományostól eltérő szemléletű számítási eszközök hozhatók létre.

Sztochasztikus rendszerek, pénzügyi matematika: Elsőként bizonyították egy folytonos idejű rekurzív maximum-likelihood becslés konvergenciáját. Ehhez kiterjesztették a kapcsolódó diszkrét idejű elméletet folytonos időparaméter esetre, valamint hibrid rendszerek stabilitásáról értek el újabb eredményeket. Kvantált megfigyeléseken alapuló becslések hatékonyságát javították egy olyan algoritmus segítségével, mely adaptív módon tolja el a kvantálási határokat. E feladat likelihood-függvényére sikerült igazolniuk a nagy számok törvényét. A pénzügyi matematikában fontos martingál folyamatokra igazoltak új tételeket diszkrét és folytonos időben. Többszereplős tőzsdemodelleket építettek, ezekhez GARCH modelleket illesztettek, valamint a paraméterek változását észlelő algoritmust készítettek.

A gépi tanulás kutatásaikat elsősorban az on-line, illetve megerősítéses tanulás területén folytatták. Az univerzális predikció területén kis számítási komplexitású algoritmusokat adtak, melyek képesek aszimptotikusan ugyanolyan jól becsülni, mint a legjobb, időben lassan változó szakértő egy (akár exponenciálisan) nagy, ám struktúrával rendelkező szakértőosztályból. A kapott módszerek komplexitása a predikció időhorizontjában és a szakértőosztály struktúrájából adódó természetes méretben is lineárisan skálázik. Hiányos információk melletti predikció esetre általánosították a korábbi több-karú rabló algoritmusukat absztrakt, megfelelő simasággal rendelkező döntési terekre sztochasztikus kifizetések esetén. Az aktív tanulás területén hatékony, aszimptotikusan optimális megoldást adtak arra a problémára, amikor több opció várható kifizetését kell egyenletesen jól becsülni. Megmutatták, hogy a simaság hogyan használható a tervezés komplexitásának csökkentésére, valamint, hogy véges időhorizontú tervezési módszerek hogyan terjeszthetők ki végtelen időhorizontra, illetve további módszereket mutattak a tervezési lépések felgyorsítására. A megerősítéses tanulás terén több új, hatékonyan megvalósítható és közel optimális eredményre vezető approximáció-alapú algoritmust adtak.

Operációkutatás: A többszemponútú döntési problémák egyik alapfeladata a szempontok fontossági súlyainak megadása, amelyre az egyik leggyakrabban alkalmazott eljárás a páros összehasonlítás mátrixok módszere. A páros összehasonlítás mátrixokra vonatkozó legkisebb négyzetes feladat egy nemkonvex optimalizálási problémára vezet, amelynek megoldására olyan módszert vezettek be, amely –  $8 \times 8$ -as mátrixméretig – gyakorlati szempontból elfogadható időn belül adja a megoldást. Ugyanerre a globális optimalizálási feladatra egy korlátozás és szétválasztási módszert is javasoltak. Matematikai programozási eszközök alkalmazásával az L-Nash megoldás egzakt és aszimptotikus alkujátékok Nash egyensúlypontjaként való előállítását mutatták meg kétszemélyes játékok esetében.

Web Spam szűréssel kapcsolatban a világ egyik legerősebb kutató helyei közé került az intézet. A keresők találati oldalain elfoglalt előkelő helyezések nagy forgalmat és így üzleti lehetőséget biztosít az adott weboldal üzemeltetőjének. Emiatt egyes weboldal üzemeltetők olyan technikákat alkalmaznak, amelyek a felhasználók számára semmiféle

többletszolgáltatást nem nyújtanak, egyetlen céljuk, hogy a céoldal helyezését a kereső rangsorokban manipulálják. Egyik fontos kutatási eredményük az objektumok közötti hálózati kapcsolatok, hiperhivatkozások vagy a résztvevők közötti szociális kapcsolatok hasznosítása a klasszifikáció feladatában. Az *ajánló rendszerekkel* kapcsolatos kutatásoknak világszerte lendületet adott a legnagyobb amerikai online DVD-kölcsönző portál, a Netflix által kiírt nagy pénzdíjú verseny. Ezen a területen új megoldást adtak, amely korábbi publikációkban fel nem lehetően nagy méretű asszociációs szabálykeresési feladatot old meg és alkalmaz a Netflix feladatra.

Az egyes főbb területek mind tematikai, mind személyi szempontból átlapolódnak, összességében a matematika-számítástudomány témakörben 46 kutató dolgozik az Intézetben. A becsült intézeti ráfordítás mintegy 410 millió Forint volt, melynek 20%-a pályázati forrás. A K+F feladatokat többek között a T-Online, a Fornax, az Econet.hu, a Magyar Telekom, az AEGON, az Emitel és hazai kis- és középvállalkozások együttműködésével végzik.

### *Informatika*

A celluláris hullámszámítások és érzékelő számítási rendszerek témakörében 2008-ban a legfontosabb eredményeik az alábbiak voltak:

- Kialakították a kilo-processzorokból felépülő mega-processzor architektúrák egy keretrendszerét.
- Olyan fizikai paramétereken nyugvó számítási komplexitást határoztak meg, amely tartalmazza a chipen jelentkező zajt is és teljesen véletlen mintázatokat képes előállítani.
- A térben diszkrét esetről a térben folytonos esetre terjesztették ki az ún. Éden sziget tulajdonságot.
- Kidolgoztak egy új 3 dimenziós celluláris érzékelő számítógép architektúrát (VISCUBE), amely mintegy 80 ezer szenzort, 20 ezer kevert módusú (analóg-bináris) szenzor-processzort és 64 celluláris digitális processzor tömböt, valamint egy közbenső celluláris digitális memória tömböt foglal magába. A celluláris digitális processzor tömb első változata elkészült és gyártásra elküldték az MIT Lincoln Laboratóriumba (a többi rész tesztje nemzetközi kollaborációban készül).
- A VISCUBE architektúra sajátosságait figyelembe vevő objektumdetektáló és pályakövető algoritmusokat készítettek.
- Elkészült a CNN Univerzális gép emulált digitális FPGA implementációja, melyen megvalósították a többrétegű CNN retinamodellt. 2D szuperszonikus áramlási modelleket implementáltak közepes komplexitású FPGA-kat használva, mintegy 1000-szeres gyorsítást elérve egy csúcsteljesítményű Pentium processzoros realizáláshoz képest.
- A digitális holografikus mikroszkóp egy új architektúráját adták, ahol a cél a vízminőség ellenőrzése, a benne levő mikroorganizmusok detektálása és azonosítása.
- A celluláris hullámszámítógépen futó algoritmusok területén új, robusztus szegmentáló algoritmust dolgoztak ki az Eye-RIS rendszeren, ami az első kereskedelmi célú vizuális mikroprocesszor tömb, 25.000 processzorral és optikai érzékelővel.

Elosztott események elemzése: Statisztikus optimalizálási eljárásokat dolgoztak ki mozgó repülőgépről készült fényképsorozaton a mozgó járművek kiszűrésére, valamint a nagy időkülönbséggel készült, előzetesen regisztrált légi felvételek összehasonlítására. A többrétegű kevert Markov modell alapú módszerben a lokális statisztikák alapján energia-optimalizálási eljárással szegmentálják az érdemi részleteket. Az eljárás különösen alkalmas a

beépítések, erdőkivágások, árasztások és a szemétkerítés felfedezéséhez. Köztéri megfigyelőrendszerekhez felügyeleti keretrendszert és a riasztási események felismerésére szolgáló szűrőket fejlesztettek ki.

A Virtuális Ember Interfész csoport az ember-gép kapcsolat új formáit kutatja, a számítógéppel animált, virtuális emberek és a virtuális valóság eszközeinek segítségével. Eredményeik között szerepel a nem-verbális kommunikáció virtuális arcokra épülő kidolgozása és a virtuális valóság eszköztárának bevezetése az oktatásban, szakmai tréningben és egészségügyben. Ennek jegyében több Internetes modult (PanoCAST és FunIcons) dolgoztak ki, amik lehetővé teszik új kommunikációs és interaktív formák létrejöttét. Az előbbi az ember-gép kapcsolat új eszköztára emberi arcok animációjára és online vezérlésére, az utóbbi pedig az interneten keresztül valósítja meg a virtuális valóság, kommunikáció és távjelenlét eszközeit. Létrehoztak és működésbe helyeztek egy új virtuális valóság rehabilitációs modult, mely sikeresen működik és támogatja a betegek kezelését.

A Grid-rendszerek kutatása terén kidolgozták a gLite alapú szervíz gridek és a BOINC alapú asztali (desktop) gridek összekapcsolásának elvi és gyakorlati módszereit. A probléma megoldására fejlesztettek egy általános grid-grid híd technológiát (3G Bridge: Generic Grid-Grid Bridge), ami lehetővé teszi a legkülönbözőbb grid rendszerek egymáshoz kapcsolását. A 3G Bridge segítségével megvalósíthatóvá vált gLite, BOINC és XtremWeb alapú gridek egymáshoz csatolása, amit az EU FP7 EDGeS (Enabling Desktop Grids for e-Science) projekt keretében be is mutattak. Ezzel hozzájárultak az EGEE grid (a világ legnagyobb tudományos célú gridje) erőforrásainak jelentős megnöveléséhez master/worker és parameter vizsgálat (parameter sweep) alkalmazások számára. Ugyancsak a 3G bridge technológia alkalmazásával és a SZTAKI Desktop Grid (SZDG) rendszer jelentős továbbfejlesztésével elérték, hogy az SZDG technológiájú asztali gridek az előző évben kifejlesztett gUSE (grid User Support Environment) segítségével közvetlenül programozhatók lettek. Az integrált gUSE-SZDG rendszert vezették be az AMRI Magyarország vállalatnál a rákkutatás elleni gyógyszerkutatás támogatására. A korábbi években kidolgozott és ma már Európa számos országában intenzíven használt P-GRADE grid portált választotta a malájziai MIMOS Berhad kutatóintézet a malájziai grid felhasználói felületének. Ennek érdekében 2008-ban két tanfolyamot rendeltek meg az MTA SZTAKI-tól és 2009-re hosszú távú együttműködést írtak alá az MTA SZTAKI-val a P-GRADE portál és a malájziai grid közös továbbfejlesztésére. A magyar kapcsolatokban kiemelkedő az Econet Rt-vel és az e-Group Kft-vel folytatott közös K+F munka az asztali gridek és a hálózati szolgáltatások területén.

Az elosztott rendszerek témakörben 2008-ban Web-alapú szoftver technológia kutatásokra és kísérleti fejlesztésekre, így digitális könyvtári rendszerek és szolgáltatások kialakítására, valamint csoportosoftver (groupware) fejlesztésekre koncentráltak:

- A japán *RICOH* nagyvállalattal közös, 3 éves kutatás-fejlesztési projekt során sikerrel teljesítették a második évre ütemezett informatikai alap- és alkalmazott kutatási tevékenységeket. A szabadalmaztatás alatt álló alapkutatási eredmények nyilvánosságra hozása és publikálása csak a Japán és USA szabadalmi oltalom megszerzése után lehetséges. Elkészült a kutatási eredményeken alapuló szoftverrendszer.
- A *BREIN* (*Business objective driven reliable and intelligent Grids for real business*) EU FP 6 nemzetközi projekt keretében alap- és alkalmazott kutatási eredményeket értek el a Grid témakörben ontológia építés, szolgáltatás integrációs modell és módszertan kialakítás területein. Vizsgálták és prototípus szinten tesztelték az ágens és kollaboratív

technológiák alkalmazhatóságát Grid környezetben. Részt vettek a BREIN prototípus architektúra tervezési folyamatában és a megvalósítás részfeladataiban.

- A *MIK (Mobil Innovációs Központ)* együttműködés keretében prototípus rendszert fejlesztettek ki összetett helyfüggő és kontextus-szenzitív szolgáltatások támogatására.

Az intézet ad otthont a *World Wide Web Consortium Magyar Irodájának* 2002 szeptemberétől kezdve. A W3C Magyar Iroda az Internet Web kommunikációs szabványainak magyar elterjesztését és a témakörrel kapcsolatos tudományos konferenciák és workshopok szervezését végzi.

Ágens-alapú szoftvertechnológiák: A K4Care projekt keretén belül módszert és működő platformot dolgoztak ki arra, hogy a K4Care platform ágens rendszerét tudásreprezentációs alapokról fél-automatikusan lehessen generálni. Az időskorú népesség személyre szabott egészségügyi ellátását célzó K4Care projekt számos régi és új EU ország specializált központjainak és szakembereinek információit, képességeit, szakértelmét és tapasztalatait integrálja.

Az Elektronikus Kormányzati Módszertani Központ (EKMK) néven három éve alapított egység létrehozta bemutató és oktatótermét, amelyben már referenciával rendelkező e-kormányzati alkalmazásokat mutattak be államigazgatási és önkormányzati szervezetek részére. Működtetik az Önkormányzati alkalmazás-szolgáltató központot, immáron 38 önkormányzat és államigazgatási szervnek nyújtva szolgáltatást. Létrehozták és működtetik a Közterület Térfelügyeleti Tanácsadó Testületet is.

A könyvtári informatika terén továbbfejlesztették két könyvtár-automatizálási programcsomagjukat: a *KisTékát* a kisebb, a *Magyar Termék Nagydíjjal* kitüntetett *HunTékát* pedig közepes és nagyobb méretű könyvtárak számára. Az előzőnek létrehozták a *Köztéka* változatát, mely elsősorban a kistéleplési könyvtárak számára ajánlott, hiszen a SZTAKI egy szerverén fut, így megszünteti a helyi üzemeltetési gondokat. 2008-ban olyan tekintélyes oktatási intézményekben került bevezetésre a HunTéka, mint a Budapesti Corvinus Egyetem és Budapesti Gazdasági Főiskola. Összességében már 230 könyvtár használja a rendszereket, mind határainkon belül, mind kívül.

eLearning területén újszerű elektronikus médiák, mint például interaktív digitális tévé és mobil eszközök oktatásban való felhasználásának metodológiai és technikai problémáival foglalkoztak a mindenhol jelenlevő oktatás megvalósítása érdekében. Elemezték olyan algoritmusok hatékonyságát, amelyek videóknak elosztott multimédia szerveren való elhelyezésére szolgálnak.

Szintén kiemelt tevékenységi területük a *hálózatbiztonsági rendszerek és felügyelet* fejlesztése. Az Internet Szolgáltatók Tanácsa által anyagilag is támogatott munka során – *Hun-CERT (Computer Emergency Response Team)* néven – hálózatbiztonsági feladatokat látnak el. Az EU által támogatott AGIS projekt keretében az elektronikus szolgáltatások ellopásának megakadályozását célzó módszerek felderítését és a kapcsolódó járulékos feladatok feltárását végzik.

A tágabb értelemben vett informatikai témakörben mintegy 73 kutató dolgozik az intézetben. A becsült intézeti ráfordítás 890 millió Forint volt, melynek 42%-a pályázati forrás. A

gazdasági haszonszerzés, illetve haszonszerzési képesség tágabb tématerületenként a következőképpen összegezhető:

- Analogikai és neurális számítógépek: A potenciális felhasználási területek (orvosi, ipari, űrkutatási, hadi, stb.) szinte beláthatatlanok. A hasznosítást részben az intézet, részben az Analogic Kft. végzi.
- Elosztott események elemzése: A lakott és a természeti környezet biztonságának növeléséhez és kényelmesebbé tételéhez járulnak hozzá az automatizálható videó megfigyelő és visszakereső rendszerek, valamint a légitűrepítés-összehasonlító eljárásai.
- Grid rendszerek: Az intézet rész vesz a különböző irányultságú, legfontosabb európai és hazai kutatási, felhasználási projekteken. Kiemelkedő a malajziai hasznosulás. A magyar kapcsolatokban igen jelentős az Econet Rt-vel és az e-Group Kft-vel folytatott közös K+F munka az asztali gridek és a hálózati szolgáltatások területén.
- Hálózatbiztonsági rendszerek: Eredményeiket számos hazai internetszolgáltató mellett – többek között – az Alkotmánybíróság, az Onkológiai Intézet, a T-Mobile, a Loughborough-i Egyetem Kriminológiai Intézete és az ISZT Kht alkalmazza.
- eGovernment: Az eredmények elsődleges felhasználói között elsősorban a Miniszterelnöki Hivatal, a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség, az Önkormányzati és Területfejlesztési Minisztérium, az ORFK, BRFK, valamint 38 önkormányzat és más államigazgatási szerv említhető. E téren együttműködnek az IBM-mel és a Microsoft-tal. Az elektronikus közigazgatással kapcsolatos e-learning sorozat nagyszámú résztvevővel folyik.
- eEgészségügy: Az eredmények és a szolgáltatások fontosabb felhasználói: Országos Egészségbiztosítási Pénztár, Országos Nyugdíjbiztosítási Főigazgatóság, SOTE, Kispesti Rehab Centrum, MediSmart Kft, MDD2002 Kft, VirMED Kft.
- Elosztott rendszerek: Nagymértékű bevételt tudnak felmutatni. A felhasználások körére korábban kitértünk, érdemes azonban a 2006-ban indult, 3 éves, MTA SZTAKI – RICOH kutatási-fejlesztési szerződést itt is kiemelni.

A hasznosításokat részben az intézet látja el, részben – szerződések alapján – informatikai kisvállalatok végzik. Az informatikai megoldások bevezetése a bővebb leírásban szereplő összes területen a versenyképesség erősítésével és az életminőség növelésével jár együtt.

#### *Automatizált irányítási rendszerek*

Az automatizált irányítási rendszerek elméleti és módszertani hátterét *a rendszer és irányításelmélet* adja. E területen a kiemelendő eredmények a következők:

- A nemlineáris rendszerek irányításelméletéhez kapcsolódva az időinvariáns geometriai rendszerelmélet eszközeit kiterjesztették állapotfüggő paraméterű lineáris modellstruktúrákra. Ezek az ún. qLPV modellek. Eredményeket kaptak bizonyos qLPV rendszerosztályok dinamikus rendszer-invertáláson alapuló szabályozó tervezésére. Az eredményeket atomerőműben és járműirányítási feladatok megoldásában alkalmazták.
- A szakaszonként lineáris kapcsolt hibrid rendszerek (switching linear hybrid systems) a hibrid nemlineáris rendszerek egy széles, a gyakorlati alkalmazások szempontjából fontos osztályának leírására alkalmasak. Az új eredmények az átkapcsolást végző irányítórendszerek irányíthatósági vizsgálatára valamint az irányíthatóság és stabilizálhatóság kapcsolatára vonatkoznak.
- Kialakításra került egy vezető nélküli földi és légi jármű irányításokkal és navigációval foglalkozó kutatólaboratórium. Az eszközök beszerzéséhez az MTA elnöke által



meghirdetett pályázati erőforrások is hozzájárultak. A kutatási programot a University of Minnesota Aerospace and Mechanics Department munkatársaival közösen alakították ki amelyhez USA kutatási támogatás is hozzájárul.

Az Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpontban (EJTT) végzett tevékenység az intelligens gépjármű-irányítási kutatásokban hoz új eredményeket. A korszerű járműfedélzeti irányítórendszerek hibatűrő kialakításának tervezési kérdései, a jármű flották felügyelete és koordinált irányítása, az intelligens vezető nélküli járműirányítási problémák, a szenzorfüziós módszerek alkalmazása (pozíció, mozgásadat és videó információk kombinálása), az elektronikus fék, kormány és menetstabilizátor alkalmazásának integrált módszerei adják a kutatás fő irányait.

A TP modell transzformációt, az LPV dinamikus modellel lineáris mátrix egyenlőtlenség alapú tervezéséhez kiegészítették konvex burok manipulálási módszerekkel. Elméletileg igazolták, és konkrét dinamikai feladatokon kimutatták, hogy a kontrol tulajdonságok optimalizálására nem elegendő csak a lineáris mátrix egyenlőtlenségek manipulálása, hanem a konvex burok manipulálásának is kulcsszerepe van. Ezzel megnyitottak egy új tervezési irányt. Kidolgozták a robotok interneten keresztül kognitív programozásának alapjait, amely lehetővé teszi robotok szinkronizált (időkésleltetést kikompenzált) mozgását az interneten keresztül.

A folyamatrendszerek és irányításuk témakörben 2008-ban született eredmények közül kiemelendők a következők:

- Kidolgozták a nemlineáris rendszerek egy nagyfontosságú osztályának, a reakció-kinetikai hálózatoknak egy adott egyensúlyi pont közelében érvényes hamiltoni leírását, amellyel a lokális stabilitási tartomány mellett a globális stabilitás is vizsgálható.
- Egy egyszerű reakció-kinetikai modellt dolgoztak ki nemlineáris biokémiai jelátvivő hálózatok leírására, amely egyaránt képes a gyors, G-protein függő és lassú, béta-Arrestin függő mechnizmusok leírására.

A nemlineáris folyamatrendszerek modellezése és irányítása területén elért elméleti eredmények alkalmazásával kidolgozták a Paksi Atomerőmű primerkörének egyszerűsített dinamikus modelljét, és a valós rendszeren normál üzemi körülmények között mért adatok segítségével megbecsülték a modell valós fizikai tartalommal bíró paramétereit. Ez a modell az alapja a primerköri szabályozók együttes újratervezésének (rekonstrukciójának).

A geometriai modellezés és számítógépes látás területén elért eredmények közül kiemelendők:

- Új robusztus módszert adtak videó-alapú mozgásdetektálásra.
- Optikai áramlás meghatározására új, változó fényviszonyok mellett is hatékony módszert fejlesztettek ki.
- Megmutatták, hogy gyengén perspektív rekonstrukcióból a perspektív kamera fókusztávolságának változása jól becsülhető.
- Numerikus eljárást adtak bonyolult felületekkel határolt mérnöki objektumok reflexiós vonalainak számítására.
- A kötegelt behangolás algoritmust alkalmazták a fotometrikus sztereó problémájára, aminek segítségével pontszerű megvilágítás esetén is képesek a háromdimenziós rekonstrukciót elvégezni.

- Új, transzcylindrikus tengelyeken alapuló mérési és számítási eljárást vezettek be a térd valódi flexiós-extenziós mozgásának mérésére és valóságghú reprodukálására.

A mérnöki és üzleti intelligencia téren folytatott kutatások fő célja olyan technikák kutatása és felhasználása, melyek alkalmasak a *változó, bizonytalansággal* terhelt környezetben működő, összetett műszaki és gazdasági rendszerek *valósídejű* kezelésére, különös tekintettel az *informatika, az operációkutatás és a tudásalapú módszerek* legújabb irányzataira, egyensúlyt teremtve az *optimalás, az autonómia és a kooperáció* terén. 2008-as főbb eredményeik:

- Az igény szerinti tömegtermelést folytató gyárak rövidtávú *ütemezésére az ún. job shop* ütemezési modell kiterjesztése és többcélú optimalizálást támogató megoldó eljárásainak kidolgozása.
- *Termelési hálózatok* vizsgálata, modellezése és hatékony működtetésükhöz szükséges matematikai és informatikai háttér kidolgozása. A kifejlesztett kooperációs mechanizmusok bizonytalan piaci kereslet mellett is lehetővé teszik autonóm felek között a beszerzési csatornák összehangolt működtetését.
- *Neurodinamikus programozáson* alapuló, sztochasztikus, dinamikus ütemezési eljárások kifejlesztése mind centralizált, mint elosztott (ágens-alapú) termelési struktúrákra, az utóbbiakat komplex adaptív (CAS) rendszereknek tekintve.
- Nemzetközi együttműködés keretében olyan informatikai megoldások kifejlesztése, melyek kis- és közepméretű vállalkozások részére is lehetővé teszik *aktív azonosítók* (pl. RFID-k) használatát termelési-logisztikai rendszerekben.
- *A matematikai és korlátozás programozás* eszköztárának bővítése olyan általános módszerekkel, melyek különösen alkalmasak vegyes értékű lineáris és hierarchikus (kétszintű) problémák megoldására, illetve összeg típusú kritériumok szerinti optimalizálásra.

A számítógéppel integrált gyártás terén kutatásaik súlypontját a kiterjesztett/virtuális vállalatok kapcsolata képezte a „kiterjesztett termékek”-kel, valamint a „lifecycle engineering”-gel és a „service engineering”-gel, figyelembe véve a környezeti szempontokat és a társadalmi elvárásokat is. Alkalmazott kutatási eredményeik fontos projektekhez kapcsolódnak:

- Jelentős eredményeket értek el a Paksi Atomerőmű Zrt. részére fejlesztett alállomási, intelligens döntéstámogató rendszerük kapcsán a biztonság és egyúttal a mérnöki/kezelői sebesség növelése érdekében. Rendszerük második verzióját és a sínbontó miatti módosításokat sikeresen üzembe helyezték. A 400/120 kV-os alállomás tréningsszimulátora a SZTAKI vezetésével készült el számos alvállalkozó segítségével.
- Az eMULT EU projekt kapcsán ágens-alapú, tudásbázisú rendszer kidolgozásában vesznek részt a szétszerelő és alkatrészkereskedő KKV-k támogatására.
- A SCULPTOR nevű EU projektben újfajta, présszerszám nélküli lemezmegmunkálási technológiák irányítási problémáival foglalkoznak.

Az automatizált irányítási rendszerek témakörben mintegy 65 kutató dolgozik az intézetben. Az intézeti ráfordítás 740 millió Forintra tehető, melynek 36%-a pályázati forrás. A gazdasági haszonszerzés, illetve haszonszerzési képesség az alábbiakkal jellemezhető:

- Rendszer- és irányításelmélet: Kiemelkedő partnerként a Paksi Atomerőmű említhető. Vitális fontossággal bír, hogy a területen magas szintű elméleti munkán alapuló hazai alkalmazási eredmények jönnek létre, és rendelkezésre áll az a szükséges know-how, mely hozzájárul ahhoz, hogy az Atomerőmű biztonságosabban és hatékonyabban tudjon

működni és kevésbé legyen kiszolgáltatott helyzetben külföldi partnereivel szemben. Az intelligens gépjármű-irányítási kutatás mind a hazai autóipar, mind az egyre fontosabbá váló logisztika szempontjából kiemelkedő fontosságú téma.

- Mérnöki és üzleti intelligencia, számítógéppel integrált gyártás, digitális vállalatok, termelési hálózatok informatikája: A létrehozott rendszerek, melyek a mindennapos használat során is beváltak, nem iparág-specifikusak, több hazai vállalatnál is felhasználhatók, akár telepített formában, akár elektronikus szolgáltatásként. A kutatás-fejlesztési eredményeket alkalmazó legfontosabb hazai vállalatok: GE Hungary ZRt, Paksi Atomerőmű Zrt, AUDI Motor Hungaria Kft, Robert Bosch Kft, Knorr Bremse Fékrendszerek Kft, M-real Petőfi Nyomda Kft, Dunapack Papír és Csomagolóanyag ZRt., Zalai Nyomda ZRt, CIB Lízing, Raiffeisen Lízing, UniCredit Lízing. Európai kutatási projektek keretében vezető ipari cégekkel dolgoznak együtt (Bosch, BMW, VW, Siemens, Continental automotive, Finn Posta, stb.). Itt is kiemelendő K+F a Hitachi Production Engineering Research Laboratory (PERL) kutatóközponttal. Az együttműködés első fontosabb eredményeként a partnerek szabadalmi eljárás kezdeményeztek.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az EU által adományozott *Centre of Excellence* kitüntető címükhöz méltóan szerepeltek az EU V. és VI. Keretprogramjaiban, ahol egyenként több mint 30 projektben, illetve kiválósági hálózatban vettek/vesznek részt, és projektvezetői feladatokat is ellátnak. Az EU VII. Keretprogramja keretében eddig 9 támogatást nyert projektben résztvevők, egy esetben konzorciumvezetői szerepet is ellátnak.

A SZTAKI – elsőként a régióból – 15 éve tagja az *ERCIM-nek (European Research Consortium for Informatics and Mathematics)*, az információtechnológia területén történő európai tudományos együttműködés elősegítésére alakult szervezetnek. Az ERCIM vette át a világméretű *WWW konzorcium európai irodáját*, a SZTAKI pedig a *WWW konzorcium magyar irodájának* ad otthont.

Összhangban az európai kutatási térség kialakítását célzó törekvésekkel, folytatják *nemzetközi virtuális intézetek és laboratóriumok* kialakítását és működtetését. A Fraunhofer Társasághoz tartozó stuttgarti székhelyű Gyártástechnológia és Automatizálási Intézettel (IPA) budapesti székhellyel már 2002-ben létrehozott Termelés és Üzleti Menedzsment Virtuális Intézet után az elmúlt években több nemzetközi virtuális laboratóriumot alapítottak, többek között a CIM Kutató Központtal (Lugano), az Ipari Technológia-Transfer Központtal (Seibersdorf), a Szófia Műegyetemmel, az INSA Rennes Egyetemmel és Bécsi Műszaki Egyetemmel. Az intézet volt egyik kulcsszereplője az EU VI. Keretprogramba tartozó, 2008-ban zárult, a gyártás területén talán legjelentősebb kiválósági hálózatnak, a VRL-KCiP-nak (*Virtual Research Laboratory on Knowledge Community in Production*) is. Új elemként, az intézet alapító tagja az *European Manufacturing and Innovation Research Association (EMIRAcle)* szervezetnek, ami önálló jogi személyként tud az európai K+F területen fellépni. Az intézet igazgatótanácsi taggal képviselteti magát a szervezetben. A SZTAKI volt a kezdeményezője a *Central European Grid Consortium* létrehozásának is, melynek célja a Közép-Európai országok Grid kutatásainak és infrastruktúra fejlesztéseinek összehangolása.

Sokat várnak a RICOH, illetve a Hitachi cégekkel K+F szerződések keretében folytatott munkáktól.

Az intézet munkatársai eredményesen működnek a témakör legjelentősebb nemzetközi tudományos szervezetek (CIRP, IEEE, IFAC, IFIP, stb.) vezetésében és munkabizottságaiban. Számos munkatársuk tagja vezető nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának.

Az intézet több kutatóját kérték fel közreműködésre a VII. Keretprogram fő irányainak kialakításában, valamint részvételre az EU és az USA (National Science Foundation) közti együttműködési témák kidolgozása során. Az MTA kétoldalú egyezményes és a TÉT kapcsolatok keretében megvalósult utazások különösen az alapkutatási fázisban igen hasznosak, a kutatók élnek is a lehetőséggel.

#### *Részvétel a hazai felsőoktatásban*

Az *egyetemi graduális és posztgraduális oktatást* az intézet továbbra is a kutatási tevékenység fontos velejárójaként és a jövőépítés elengedhetetlen feltételeként kezeli. Rendszeres oktatási tevékenységet folytatnak a következő hazai felsőoktatási intézményekben: BME, ELTE, BKÁE, VE, PTE, ME, PPKE. Az együttműködési formák sokrétűek: kutatók teljes, vagy egészállású egyetemi foglalkoztatása, kihelyezett tanszékek, egyetemi tanszékek vezetése, közreműködés informatikai karok létrehozásában.

A *Magyar Info-Bionikai Központot* az elektronika-informatika és a biológiai tudományok területén (különös tekintettel a neurobiológiára) a Magyar Tudományos Akadémia 6 kutatóhelye és 6 egyetemi kutatólaboratórium működteti. Szintén a SZTAKI kezdeményezésével jött létre a *Magyar Grid Kompetencia Központ (MGKK)* a BME, ELTE és NIIFI részvételével, később csatlakozott az RMKI is.

Sokéves együttműködés újabb jeleként, a *Regionális Egyetemi Tudásközpontok* keretében, a SZTAKI részt vesz a BME által vezetett *Elektronikus jármű és járműirányítási tudásközpont* projektben. Szintén kiemelendő az intézet szerepe a *Mobil kommunikációs kutatás-fejlesztési központ és innovációs centrum* című, a BME-vezetésű NKTH projektben.

Átlagosan mintegy 30 PhD hallgató végzi kutatómunkáját az intézetben, vezető kutatók témavezetése mellett. A hazai doktori iskolákban munkatársaik 25 esetben szerepelnek külső, és 5 ízben belső alapító tagként.

A tradicionális oktatási módszerek mellett léptek mind a *multimédia eszközök* felhasználása, mind a *távoktatás* felé.

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

2008-ban is jelentős számú, az EU által támogatott projektjük indult, melyek keretében többségében kiemelkedő egyetemekkel, kutatóintézetekkel és több esetben világhírű cégekkel dolgoznak együtt. Belőlük most néhányat emelünk ki, több, hazai támogatású projekttel együtt):

– *EDGeS: Enabling Desktop Grids for e-Science (FP7, 2008–2009)*

A grid rendszerek együttműködésének és integrálásának témája kiemelt terület a grid kutatásokban. Az EDGeS projekt célja, hogy az alapvetően klasztereket összekapcsoló 7/24 működésű szolgáltatói grideket (SG) integrálni lehessen az önkéntes elven szerveződő desktop gridekkel (DG). A Párhuzamos és Elosztott Rendszerek Kutató Laboratórium (PERL) koordinálja az EDGeS projektet, amin belül egy olyan általános grid-grid hidat (Generic Grid-Grid Bridge – 3G Bridge) hoztak létre, mellyel a legkülönbözőbb SG és DG rendszerek váltak integrálhatóvá. Az EDGeS projekten belül a 3G Bridge technológiára alapozva a világ legnagyobb desktop grid rendszerét (BOINC) integrálták a világ legnagyobb szolgáltatói gridjével (EGEE). A 3G Bridge megoldás olyan általános, hogy erre alapozva az INRIA kutatói megoldották az XtremWeb DG rendszer és az EGEE grid integrálását is. Az EGEE és DG rendszerek integrálása lehetővé teszi, hogy bármely EGEE virtuális szervezet (VO) kapacitását önkéntes desktop gridbe szervezett egyetemi, vállalati és otthoni PC-kkel tudja megtöbbszörözni. Így lehetővé válik, hogy minimális beruházási költséggel nagy számítás kapacitásokat koncentráljanak. Az EGEE és DG rendszerek integrálása az ellenkező irányú kapacitásbővítésre is felhasználható. Így például a projektben a Correlation Systems izraeli cég vállalati desktop grid rendszere lett hozzákapcsolva a központi EDGeS VO-hoz és ezzel a vállalati grid kapacitása jelentős mértékben megnőtt. A projektben kidolgozott technológiát két további cég (a spanyol Atos Origin és a holland Erasmus Medical Center) is alkalmazni fogja.

– *AC/DC Five Days Car projekt (FP7, 2007–2010)*

A projekt célja az európai autógyártók versenyképességének növelése olyan beszállítói hálózat létrehozása és működtetése révén, amely igen rövid, akár 5 napos határidővel képes kielégíteni az aktuális vevőigényeket a személygépkocsik piacán. Az ezzel kapcsolatos feladatok felölelik a termelésinformatika szinte valamennyi kulcsproblémáját: a terméktervezéstől a beszállítói hálózatok szervezéséig. A négyéves futamidejű projekt fő ipari partnerei vezető német autógyártók (BMW, Volkswagen), valamint olyan autóiipari beszállítók, akik maguk is világméretű hálózattal rendelkeznek (Continental, Siemens VDO, ZF Friedrichshafen). A kutatás-fejlesztés egyik iránya olyan moduláris termékstruktúra kialakítása, amely lehetővé teszi a gépjárművek minél későbbi, egyedi igényeknek megfelelő konfigurálását. Az MTA SZTAKI jelenleg a másik témában vesz részt, amely célja olyan, kooperáción alapuló hálózat menedzselési módszerek és kommunikációs infrastruktúra kidolgozása, melyek alacsony raktárkészletek mellett is biztosítják a hálózat minden rétegében a végtermék-gyártóktól elvárt igen magas, közel 100%-os kiszolgálási szintet. A kutatás során az intézet hozzájárult a kommunikációs protokollok és egy, az adott területre jellemző közös fogalmi rendszer – ún. számítógépes ontológia – , valamint együttműködési mechanizmusok kidolgozásához.

– *LiWA: Enrichment tools for Web archive (FP7, 2008–2010)*

A projekt célja a Web tartalom archiválását „élővé” tenni. A Web tartalom hosszú távú megőrzése szolgálhat például tudományos vagy piackutatási célokat, vagy dönthet szerzői jogvitában, stb. A tartalom megőrzése iránt növekvő igényt mutatnak mind a könyvtárak, mind az archiváló szervezetek, mind a kialakulóban levő piacorientált szolgáltatások. A Web tartalom bizonyos sajátosságai, gyors dinamikája, illékonyága, formátum és szolgáltatás variánsai nagy kihívást jelentenek a megőrzés, archiválás területén. A projekt

keretében átlépi a „fagyasztott” pillanatkép megőrzésének kereteit, és a pillanatfelvételek megőrzésén túl olyan „élő” Web archívumot kívánnak létrehozni, amely

- hosszú távú interoperabilitást valósít meg az archívumok fejlődése mellett,
- tiszta minőségű, lényegtelen „zajtól” mentes információt tartalmaz,
- a formátumok széles választékát öleli fel.

A LiWA projektben az MTA SZTAKI szerepe a Web spam szűréssel kapcsolatos részfeladat vezetése, és szövegbányászati feladatok elvégzésében is közreműködnek. Hozzájárulásukat a Web spam szűréssel, a képi és szöveges keresőrendszerekkel kapcsolatos kutatásaik alapozták meg. Európai szintű siker, hogy résztvevői az FP7 Digital Libraries első felhívás 9 támogatást nyert STREP pályázata közül kettőnek.

- *i-TRACS: Intelligent Tracking System for Conter-Terrorism (FP6, 2007–2008)*

Az i-TRACS projekt célja az volt, hogy egy fejlett, széleskörű adatforrásokot integráló nyomkövető rendszer fejlesztésével növelje az EU privát és állami intézményeinek versenyképességét a terror-elhárítás és belbiztonság területein. A projekt megvalósító konzorcium tagjai mind a technológia, mind a törvényi szabályozás, mind pedig a piacon elérhető eszközök ismeretével rendelkeznek. A projekt fő kihívása megtalálni az egyensúlyt a nyomkövetés és a személyes adatok és polgári szabadságjogok védelme között abból a célból, hogy egy társadalmilag elfogadott, hatékony szoftvertechnológia jöjjön létre. A munka során olyan újszerű prototípus valósult meg, amely képessé teszi a megfelelő felhatalmazással bíró szervezetet arra, hogy gyanúsított személyek adatait összegyűjtsék, kapcsolatrendszerüket, mozgásukat nyomon kövessék, és előkészületben levő cselekményeik végrehajtását megakadályozzák. Az MTA SZTAKI szerepe a projekt megvalósítása során a rendszer tervezése, illetve olyan adatbányászati eszközök fejlesztése volt, amelyek az adatok teljes körének összegyűjtése nélkül, csak a gyanúsított személyekre vonatkozó lokális lekérdezésekkel képesek kapcsolati hálózatokat feltárni.

- *TEXTREND: Intelligens szövegbányász alkalmazásplatform (Jedlik 2008–2010)*

A pályázat két, egymásra épülő célja (1) az integrált TEXTrend Platform eszköztár és szolgáltatási bázis létrehozása, ill. (2) az eszköztár demonstrációs alkalmazásainak kidolgozása a gazdasági és szakpolitikai döntéshozatal különböző területein. A TEXTrend platform célja a weben található dinamikus és óriási mennyiségű információ mély elemzése valamely specifikus területen, mint például a tudomány vagy a gazdasági élet. Ez alatt az értendő, hogy szemben a szokásos kivonatolási vagy egyszerűen indexelési szolgáltatásokkal, a weben elérhető adathalmazból minőségileg új információt nyernek ki, aminek az előállítása egyenesen lehetetlen lenne pusztán emberi erőforrást felhasználva. Jó példa a trendek elemzése, ahol a cél az hogy nagy mennyiségű dokumentumból (blogok, cikkek, stb.) meghatározzuk, sőt, megjósoljuk a közvélekedés vagy érdeklődés jellemzőit, vagy időbeli változását. Egy másik példa látens (pl. szociális) struktúrák felderítése és egy szempillantás alatt áttekinthetővé tétele automatikus szövegfeldolgozás, hálózatokat kezelő algoritmusok, és vizualizáció segítségével, pl. egy terület hatalmi és befolyási hálózata esetében. A sort sokáig lehetne folytatni. Ezek a mély információk a megfelelő területeken felbecsülhetetlen értékkel bírhatnak. Gondoljunk a politikai vagy gazdasági döntéshozatalra, vagy a tudományfinanszírozás kérdésére.

- *TRASER, Azonosító-alapú termékövetési- és web-szolgáltatások KKV-k számára (FP6, 2007–2009)*

Az MTA SZTAKI által koordinált EU-VI-os projekt partnerei a változó termelési hálózatokban, beszállítói láncokban résztvevő vállalatok számára fejlesztenek, tesztelnek és dokumentálnak újszerű, nyílt forráskódú megoldásokat a termékek és adataik nyomon követésére. A projekt eredményeként olyan nyílt forrású szoftver-platform jön létre a termékek és adataik nyomon követésére, amely nem igényel költséges kezdeti beruházást, együtt használható a már meglévő, elterjedt, de kevésbé fejlett rendszerekkel, kicsi fejlesztés- és karbantartásigénye pedig nem követeli meg nagy szakembergárda állandó foglalkoztatását. A KKV-knak továbbá lehetőséget ad arra, hogy hozzáférjenek a szállítmányozó cégek árukövető infrastruktúrájához és RFID-olvasóihoz.

- *RELIAWIND: Reliability-focused research on optimizing wind energy systems design, operation and maintenance (FP7, 2008–2011)*

A projekt célja a megújuló energiaforrások terén egyre jelentősebb szerepet betöltő szélenergiaforrások, szélenergiafarmok megbízhatóságának növelése, különös tekintettel a tengerre telepített rendszerekre, ahol a szervizelési és karbantartási munkálatok sokkal nagyobb költségkihatással bírnak, mint a szárazföldi telepek esetén. Az iparág legjelentősebb európai szereplőivel (GAMESA, HANSEN, ABB, SKF, stb.) együttműködve, az MTA SZTAKI feladata az intelligens felügyeleti és diagnosztikai rendszerek kifejlesztése.

- *Újgenerációs vasúti csúszás- és perdülésgátló berendezés a fékhatásosság és a biztonság növelése érdekében*

A GVOP támogatással a Knorr-Bremse és a BME Vasúti Járművek Tanszékkal együttműködésben folyó projekt keretében a vasúti fékek hatásosságának növelését célzó szabályozási módszerek kutatása folyik. A projekt első két évében a fékezés fizikai folyamatainak megértése, a modellépítés, valamint a szabályozás elvi lehetőségeinek kutatása folyt. Kidolgozásra került a csúszásmentes fékezés modell alapú szabályozási algoritmus, melyben fontos szerepet kapott a kerék-sín kapcsolatot jellemző tapadási együttható becslése megfigyelő alapú identifikációs módszerrel. Az algoritmust vasúti szimulációs környezetben tesztelték, és alkalmassá tették a valós körülmények közti implementációra.

- *EJTT: Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont*

Az MTA SZTAKI a BME által vezetett Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont (EJTT) több projektjében meghatározó szerepet tölt be. Az intézet kutatásai során szoros együttműködést alakított ki a konzorciumi partnerekkel, így ipari vállalkozásokkal és egyetemi tanszékekkel. A Tudásközpont célkitűzése, hogy a Magyarországon az elektronikus irányított jármű és járműrendszerek területén az elmúlt években akadémiai és egyetemi környezetben felhalmozott tudást, és a gyártáson/szerelésen túlmenően kutatás-fejlesztéssel is foglalkozó járműipari háttérrel összekapcsolja, és az így létrejött tudásbázist rendszerezve és továbbfejlesztve az iparág más résztvevői, elsősorban a hazai beszállítók rendelkezésére bocsátja kutatás-fejlesztési szolgáltatás formájában. Különösen fontos az alábbi projektek eredményességét megemlíteni.

- A kommunikációs hálózaton alapuló rendszerirányítás témában nagy hangsúlyt kapott a közúti forgalomirányítás korszerű módszereinek kutatása, ezen belül a

kereszteződés, autópályák és gyorsforgalmi utak közlekedésének hatékony irányítása. A kooperatív járműirányítási kísérletek céljából a vezeték nélküli irányítási hálózatok kutatásában és a közlekedésben résztvevő egyedek közötti kommunikációs lehetőségek vizsgálatában értek el fontos eredményeket.

- Gépjárművek aktív komponensei funkcionális integrálási lehetőségei kutatásának célkitűzése az erőforrások jobb kihasználása és a közöttük lévő kedvezőtlen kölcsönhatások kiküszöbölése. Az integrálás megteremtette a megváltozott környezeti feltételekhez alkalmazkodni tudó átkonfiguráló irányítások és a hibatűrő irányítások kialakításának lehetőségét is. Az aktív fék, kormány, felfüggesztés és hajtás összehangolt megtervezése a közlekedésbiztonság növelését, az utazási kényelem javítását és a személy és áruszállítás hatékonyságának növekedését eredményezte.
- A hibatűrő fedélzeti elektronikus C-By-Wire típusú rendszerarchitektúrák megvalósításának vizsgálata során megvizsgálták a lehetséges specifikációs, tervezési, és kivitelezési módszereket. Ennek során előkészítettek egy nagymegbízhatóságú járműirányítási architektúrát demonstráló prototípust.

Szintén az intézet és a BME közötti jó együttműködést jelzi, hogy az Intézet szerepel a *Mobil kommunikációs kutatás-fejlesztési központ és innovációs centrum* szervezetben.

A fenti felsorolásból is kiderül, hogy az informatika és más tudományágak (anyag-, élet- és társadalomtudomány, matematika, mesterséges intelligencia, rendszer- és irányítástechnika, automatizálás, operációkutatás) és felhasználási területek (érzékelő számítógépek, járműipar, közlekedés, gyártásautomatizálás, gyártásszervezés, kulturális örökség, egészségügy, információs társadalom, adatbiztonság, gyógyászat) olyan interdiszciplináris kutatásra, fejlesztésre koncentrálnak, melyek hosszabb távon alapozhatják meg az intézet jövőjét.

Kapcsolataik ezúton is erősödnek olyan kiemelkedő szerepet betöltő nagyvállalatokkal, mint a GE, Audi, Magyar Telekom, MOL, Paksi Atomerőmű, Knorr Bremse, Bosch, ugyanakkor a kisvállalati résztvevők biztosítékokat jelentenek arra, hogy eredményeik a lehető legszélesebb körben terjedjenek el. Tengerentúli (USA és Japán) kooperációik pedig egészen új távlatokat nyitnak.

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

1. Ercsey-Ravasz M, Roska T, Néda Z: Statistical physics on cellular neural network computers. *Physica D-Nonlinear Phenomena* 237 (9): 1226-1234 (2008)
2. Földesy P, Zarándy Á, Rekeczky C: Configurable 3D-integrated focal-plane sensor-processor array architecture. *International Journal of Circuit Theory and Applications* 36 (5-6): 573-588 (2008)
3. Nagy Z, Kék L, Kincses Z, Kiss A, Szolgay P: Toward exploitation of cell multi-processor array in time-consuming applications by using CNN model. *International Journal of Circuit Theory and Applications* 36 (5-6): 605-622 (2008)



4. Szatmári I, Chua L: Awakening dynamics via passive coupling and synchronization mechanism in oscillatory cellular neural/nonlinear networks. *International Journal of Circuit Theory and Applications* 36 (5-6): 525-553 (2008)
5. Csuhaj Varjú E, Paun G, Vaszil G: Tissue-like P systems with dynamically emerging requests. *International Journal of Foundations of Computer Science* 19 (3): 729-745 (2008)
6. Csuhaj Varjú E, Vaszil G: (Mem)brane automata. *Theoretical Computer Science* 404 (1-2): 52-60 (2008)
7. Gyárfás A, Lehel J, Sárközy G, Schelp R: Monochromatic Hamiltonian Berge-cycles in colored complete uniform hypergraphs. *Journal of Combinatorial Theory. Ser. B.* 98 (2): 342-358 (2008)
8. Gyárfás A, Ruszinkó M, Sárközy G, Szemerédi E: Three-color Ramsey numbers for paths. *Combinatorica* 28 (4): 499-502 (2008)
9. Benedek C, Szirányi T: Bayesian foreground and shadow detection in uncertain frame rate surveillance videos. *IEEE Transactions on Image Processing* 17 (4): 608-621 (2008)
10. Fazekas S, Amiaz T, Csetverikov D: Dynamic texture detection based on motion analysis. *International Journal of Computer Vision* (DOI: 10.1007/s11263-008-0184-y): 1-16 (2008)
11. György A, Linder T, Lugosi, G: Tracking the best quantizer. *IEEE Transactions on Information Theory* 54 (4): 1604-1625 (2008)
12. Demetrovics J, Katona G, Miklós D: Functional dependencies distorted by errors. *Discrete Applied Mathematics* 156: 862-869 (2008)
13. Györfi L, Wegkamp M: Quantization for nonparametric regression. *IEEE Transactions on Information Theory* 54 (2): 867-874 (2008)
14. Vazquez A, Rácz B, Lukács A, Barabási A: Impact of non-Poissonian activity patterns on spreading processes. *Physical Review Letters* 98: 158702-1-158702-4 (2007)
15. Ivanyos G, Nagy A, Rónyai L: Constructions for quantum computing with symmetrized gates. *Quantum Information and Computation* 8 (5): 411-429 (2008)
16. Ivanyos G: On solving systems of random linear disequations. *Quantum Information and Computation* 8 (6-7): 579-594 (2008)
17. Csáji B, Monostori L: Value function based reinforcement learning in changing Markovian environments. *Journal of Machine Learning Research* 9 : 1679-1709 (2008)
18. Kovács A, Beck J: A global constraint for total weighted completion time for cumulative resources. *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 21 (5): 691-697 (2008)
19. Váncza J, Egri P, Monostori L: A coordination mechanism for rolling horizon planning in supply networks. *CIRP Annals-Manufacturing Technology* 57 (1) : 455-458 (2008)
20. Fülöp J: A method for approximating pairwise comparison matrices by consistent matrices. *Journal of Global Optimization* 42 : 423-442 (2008)
21. Mészáros C: On numerical issues of interior point methods. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Optimization* 30 (1) : 223-235 (2008)

22. Rapcsák T: Sectional curvatures in nonlinear optimization. *Journal of Global Optimization* 40 : 375-388 (2008)
23. Kacsuk P, Kiss T, Sipos, G: Solving the grid interoperability problem by P-GRADE portal at workflow level. *Future Generation Computing Systems* 24 (7): 744-751 (2008)
24. Keviczky L, Bányász C: A new iterative procedure to obtain H-infinity, L-infinity optimal regulators. In: *IFAC 2008. 17th IFAC World congress. Seoul, 2008. Seoul, IFAC, 8791-8796 (2008)*
25. Poussot-Vassal C, Sename O, Dugard L, Gáspár P, Szabó Z, Bokor J: A new semi-active suspension control strategy through LPV technique. *Control Engineering Practice* 16 (12): 1519-1534 (2008)
26. Szabó Z, Gáspár P, Bokor J: Discussion on: combining slip and deceleration control for brake-by-wire control systems: a sliding-mode approach. *European Journal of Control* 13 (6): 615-617 (2007)
27. Csercsik D, Hangos K, Nagy G: A simple reaction kinetic model of rapid (G protein dependent) and slow (b-Arrestin dependent) transmission. *Journal of Theoretical Biology* 255: 119-128 (2008)
28. Fazekas C, Szederkényi G, Hangos K: Parameter estimation of a simple primary circuit model of a VVER plant. *IEEE Transactions on Nuclear Science* 55 (5): 2643--2653 (2008)
29. Magyar A, Szederkényi G, Hangos K: Globally stabilizing feedback control of process systems in generalized Lotka-Volterra form. *Journal of Process Control* 18: 80-91 (2008)
30. Precup R, Preitl S, Tar J, Tomescu M, Takács M, Korondi P, Baranyi P: Fuzzy control system performance enhancement by iterative learning control. *IEEE Transactions on Industrial Electronics* 55 (9): 3461-3475 (2008)
31. Bazgan C, Tuza Z, Vanderpooten D: Approximation of satisfactory bisection problems. *Journal of Computer and System Sciences* 74 (5): 875-883 (2008)
32. Tuza Z: Hereditary domination in graphs: characterization with forbidden induced subgraphs. *SIAM Journal on Discrete Mathematics* 22 (3): 849-853 (2008)
33. Gerencsér L, Michaletzky G, Orlovits Z: Stability of block-triangular stationary random matrices. *Systems and Control Letters* 57: 620-625 (2008)
34. Guasoni P, Rásonyi M, Schachermayer W: Consistent price systems and face-lifting pricing under transaction costs. *Annals of Applied Probability* 18 (2): 491-520 (2008)
35. Takács B, Hanák D: A prototype home robot with an ambient facial interface to improve drug compliance. *Journal of Telemedicine and Telecare* 14 (7): 393-395 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	278	Ebből kutató <sup>2</sup> :	212
PhD, kandidátus:	65	MTA doktora:	22
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	8
			86
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			360
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			360
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	85
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	17	idegen nyelven:	26
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	111	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	2149
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2149
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	1	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	7	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	149	posztterek száma <sup>10</sup> :	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	94	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	53
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			65
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	26	Diplomamunkát:	33
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	57
			2697
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			1559 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	23	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	1825 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			13
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	48 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			14
NKFP:	11	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	371 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :9		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	77 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup>			40
EU-forrásból:	38	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	326 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	27 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			48
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	956 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			174 MFt

## SZILÁRDTESTFIZIKAI ÉS OPTIKAI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly-Thege M. út 29-33  
Levél cím: 1525 Budapest, Pf. 49  
Telefon: 392-2212, fax: 392-2215  
e-mail: szfki@szfki.hu, honlap: www.szfki.hu/

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

Alapkutatások végzése az elméleti és kísérleti szilárdtestfizika (kondenzált anyagok fizikája, nanoszerkezetek, vékonyrétegek és felületek fizikája), továbbá az elméleti és kísérleti optika (optikai kristályok fizikája, nemlineáris és kvantumoptika, lézerfizika) területén. Alkalmazott kutatások végzése (új anyagok előállítása és vizsgálata, új anyagvizsgáló módszerek fejlesztése, optikai kristályok és vékonyréteg eszközök előállítása és alkalmazása, valamint a lézerek fejlesztése és alkalmazása). Az alaptevékenységhez illeszkedő új metodikák fejlesztése. Graduális és posztgraduális szakemberképzés.

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

#### *Erősen korrelált rendszerek*

Az általuk korábban kifejlesztett DMRG módszert alkalmazva a kétcsatornás Kondó modellre külső mágneses tér jelenlétében alkalmazva megmutatták, hogy ez a eljárás sokkal pontosabb – és lényegesen rövidebb idő alatt elérhető – eredményre vezet, mint az egyéb eddig használt renormalizációs csoporton alapuló módszerek.

Tovább folytatták a szokásos SU(2) Hubbard lánc SU(n)-re való általánosítását racionális betöltöttségek esetére. Megmutatták, hogy kötések rendeződése a spin kicserélődési kölcsönhatás egyenes következményeként jön létre.

A TTF-TCNQ kvázi egydimenziós vezető fotoemissziós spektrumának értelmezésére kiszámolták a korrelációs függvények exponenseiben fellépő fázistolásokat a Tomonaga-Luttinger modellben a Bethe Ansatz alkalmazásával. Ez az eredmény nagyon hasznos, nemcsak a alacsony dimenziós szerves vezetők szokatlan spektrális viselkedésének megértéséhez, de alkalmazható az ultrahideg, korrelált fermion rendszerek egy- és két atomos spektrál függvényének értelmezésére is.

*Résztevők: 13 kutató, ebből 9 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 43 MFt költségvetési támogatás, 8 MFt hazai pályázatok.*

#### *Komplex rendszerek*

A kétdimenziós Ising modellben megvizsgálták, hogy a kölcsönhatás alakjának ugrásszerű megváltoztatása milyen hatással van a rendszer nem egyensúlyi kritikus viselkedésére. Megmutatták, hogy a mágneszettség relaxációja és az autókorrelációs függvény lecsengésének kritikus exponense a kezdeti állapot univerzalitási osztályától függő hatványfüggvény viselkedést mutat.

A csapdázott Fermi gázok szuperfolyékony állapotát vizsgálva meghatározták a gradiens korrekciókat a gyenge kölcsönhatású esettől kiindulva az unitér határesetig.

A taszító párkölcsönhatás esetén, feltételezve, hogy a rendszer hullámfüggvénye a hullámszámok szerint faktorizálható, feltérképezték a Bose rendszerek lehetséges alapállapotait. Megmutatták, hogy a zérus momentumú állapotban lévő részecskék száma arányos a térfogattal, de fluktuációja anomálishan nagy a Valatin-Butler állapotban, míg a Nozieres-Saint James állapotban ez utóbbi normál értéket mutat.

*Résztvevők: 15 kutató, ebből 6 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 43 MFt költségvetési támogatás, 5 MFt hazai pályázatok.*

### *Elektronállapotok fémekben*

Elsőként alkalmazták a sűrűség funkcionál elméletet az ausztenites (rozsdamentes) acélötvözetek tömbi tulajdonságainak meghatározására. Többek között kiszámolták a lapcentrált köbös Fe-Cr-Ni ötvözet egyensúlyi térfogatát, rugalmas állandóit, szerkezeti stabilitását, polikristályos rugalmas tulajdonságait, valamint a pakolási hibák képződési energiáját.

Az EMTO módszer alkalmazásával elsőként mutatták meg, hogy alacsony hőmérsékleten kb. 5% Cr oldható fel a ferromágneses tércentrált köbös vasban, ugyanakkor az oldhatósági határ gyakorlatilag nulla a paramágneses fázisban. Ennek az anomális viselkedésnek fontos következményei vannak a Fe-Cr ötvözetek (ferrites acél) rugalmas és felületi tulajdonságaira.

A sűrűség funkcionál módszert alkalmazva, elsőként sikerült megmutatni, hogy az akceptorral adalékolt szilícium és germánium az adalék koncentrációjának növelésével szupravezető állapotba mehet át. Megbecsülték az ehhez szükséges kritikus koncentrációkat, amely kb. 2,6% a Si:B és 2,2% a Ge:B esetén.

Megvizsgálták a Fe-Ni ötvözet szerkezetét magas nyomáson (200-350 GPa) és megmutatták, hogy 10% Ni 230 GPa-on 32 meV-tal, míg 350 GPa-on 41 meV-tal stabilizálja a tércentrált köbös fázist a hexagonális fázishoz képest. Ebből arra lehetett következtetni, hogy a Föld magjában a Fe-Ni tércentrált köbös fázisban van jelen, magyarázatot adva ezzel a mag szeizmikus hullámok segítségével megbecsült anizotrópiájára.

*Résztvevők: 20 kutató, ebből 7 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 50 MFt költségvetési támogatás, 7 MFt hazai pályázatok.*

### *Nem-egyensúlyi ötvözetek*

Az amorf és nanoméretű mágneses rendszerek vizsgálata mind a jelenségek elvi megértése mind a gyakorlati alkalmazások szempontjából a nemzetközi kutatás homlokterében áll. E területen az alábbi fontosabb kutatási témákat vizsgálták:

Nanokristályos ötvözetek vizsgálata —  $\text{Fe}_{83-x}\text{Co}_x\text{Ge}_5\text{Zr}_6\text{B}_5\text{Cu}_1$  ( $x=5, 20$ ) összetételű, különböző kristályos hányadokat tartalmazó ötvözetek kezdőpermeabilitásának ( $m$ ) hőmérsékletfüggését tanulmányozták szobahőmérséklettől 1000 K-ig. A nanokristályosodás növekvő mértékével  $m$  egyre kevésbé függ a hőmérséklettől.

Magnetokalorikus effektus vizsgálata — A mágneses entrópia változását tanulmányozták  $\text{Fe}_{92-x}\text{Cr}_8\text{B}_x$  ( $x=12, 15$ ) összetételű amorf ötvözetekben. A börtartalom növelésével az entrópia-változás maximuma és a Curie hőmérséklet növekszik. Gyakorlati alkalmazásként érdekes mágneses hűtés szempontjából alapvető entrópia-változás görbéinek termikus és térfüggését az Arrott-Noakes-féle állapotegyenlet segítségével elemezték.

Szekvencia permutált multirétegek — Fe/B/Ag illetve Fe/Ag/B multirétegek összehasonlítását végezték annak vizsgálatára, hogy a rétegek közötti különböző határrétegek milyen tulajdonságokat mutatnak. Transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatok segítségével megállapították, hogy a rétegek sorrendje jelentősen befolyásolja a rétegek morfológiai tulajdonságait. Ez elsősorban abból ered, hogy az Ag réteg a Fe rétegre egyenletesen, míg a B rétegre csak a rétegek nanométeres vastagságával összemérhető hullámossággal növekszik. Mössbauer spektroszkópiai vizsgálatokkal kimutatták, hogy a rétegsorrend a Fe és B rétegek közötti keveredést és a keveredés során kialakuló amorf réteg összetételét is befolyásolja. Ennek két okát tárták fel: a Fe és B rétegekkel nem keveredő Ag réteg különböző egyenetlensége a kétféle rétegsorrend esetén, valamint a Fe/B és a B/Fe határrétegek különbözősége.

*Résztevők: 23 kutató, ebből 6 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 43 MFt költségvetési támogatás, 9 MFt hazai pályázatok.*

### *Röntgendiffrakció*

Szén alapú rendszerek kaloriméterrel való tanulmányozása során meghatározták a  $\text{C}_{60}$ -kubán és a  $\text{C}_{70}$ -kubán co-kristályok orientációs fázisátmenetének termodinamikai sajátosságait. Sikeresen szintetizálták a  $\text{C}_{60}$ -bis-isocianato-kubánt, a rotor-sztátor család egy új, alacsony szimmetriájú tagját. Ezen túl kubán-fullerén co-kristályok optikai tulajdonságai nyomásfüggésének vizsgálata során két új fázisátalakulást találtak.

A szén alapú anyagok egy másik családján, az átlátszó nanocső filmekben végzett optikai mérések eredményeire támaszkodva korrelációt állapítottak meg az átlagos átmérő, a spektrális tulajdonságok és a fémes nanocső tartalom között. Továbbá megállapították, hogy nukleofil reagenssel való funkcionálásakor a kisebb átmérőjű nanocsövek preferáltak.

Továbbfejlesztették az előző években kidolgozott, kristályok szerkezetének ab initio meghatározására alkalmas iteratív algoritmust. Ennek keretében megmutatták, hogy van lehetőség a delta küszöbparaméternek a korábbiaknál jobb megválasztására. Módszert vezettek be a végső megoldás minőségének javítására és kidolgozták annak lehetőségét, hogy a szerkezetről való előzetes információkat hogyan lehet beépíteni a megoldásba.

A fázismező elmélet keretei között kidolgozták az idegen felületek nedvesítési tulajdonságainak kezelését és a heterogén csíráképződés leírását egykomponensű és binér rendszerekben. A korábban kifejlesztett, krisztallográfiai orientációt is tartalmazó fázismező elmélet segítségével folytatták a polikristályos szerkezetek vizsgálatát. Megszilárdulási folyamatokat tanulmányoztak atomisztikus fázismező elmélet segítségével.

Egyedi molekulák szabadelektron röntgen lézerrel való szerkezet-meghatározásával kapcsolatosan modellszámolásokat végeztek, melynek segítségével megmutatták, hogy a minta körül alkalmazott víz (vagy más) védőréteg jelentősen lassítja a robbanás folyamatát.

Ezen túl a mért szórásképek osztályozásával összefüggésben meghatározták azt a minimális mintaméretet, amely mellett még sikeresen elvégezhető az osztályozás.

*Résztvevők: 65 kutató, ebből 16 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 115 MFt költségvetési támogatás, 28 MFt hazai és 87 MFt külföldi pályázatok.*

*Elektronkristályok, fémfizika, fémtechnológia és mágnesség*

Nagyáramú elektromos transzportmérésekkel tanulmányozták a magashőmérsékletű szupra-vezetőkben a mágneses örvényrendszer hőmérséklet – mágneses tér fázisdiagramját. Modellt állítottak fel az alacsony hőmérsékleten megfigyelt üveges viselkedés leírására, amely segítségével sikeresen értelmezték a disszipáció küszöbáramának hiszterézisét és lassú relaxációját.

Vizsgálták az SZFKI-ban felfedezett  $C_8H_8 \times C_{60}$  kubán-fullerén rendszer  $^{13}C$  NMR tulajdonságait. Megmutatták, hogy a kétféle molekula között nincs számottevő töltésátadás. A spin-rács relaxációs idő hőmérsékletfüggése alapján megerősítették azt a feltételezést, hogy 145 K-en egy elsőrendű orientációs rendeződési fázisátalakulás van ebben a rendszerben.

*Résztvevők: 6 kutató, ebből 4 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 28 MFt költségvetési támogatás, 3 MFt hazai pályázatok.*

A  $Pd_{1-x}Ag_xH$  rendszereken vizsgálták a hidrogén bevitel (eltávolítás) folyamatát szimultán hidrogénkoncentráció és mag spin-spin relaxációs idő mérések alapján.

Az eredetileg rendezetlen (nem feltekeredett) DF31 fehérje és a referenciaként szolgáló globuláris ubiquitin fehérje vizes oldataiban elvégezték a fehérje hidratációjának vizsgálatát az itt kidolgozott új NMR és DSC módszerek alapján, meghatározva a hidrátburok nagyságát és heterogenitását.

*Elektrokémiai úton leválasztott minták* vizsgálatához olyan mintakezelési eljárást fejlesztettek ki, amely lehetővé teszi a mintáknak a leválasztás irányát követő („reverz”) mélységi analízisét. Az MTA ATOMKI-val együttműködésben végzett mélységprofil-analízis megmutatta, hogy a nanométeres rétegekből álló multirétegek sokkal finomabb felbontásban vizsgálhatók a reverz technikával, mint a végső mintafelület irányából. Továbbá röntgendiffrakciós vizsgálatokkal kimutatták, hogy elektrolitikus Co/Cu multirétegek képződése során létezik olyan Cu réteg vastagságtartomány, amelynél a szerkezeti hibák legkevésbé fordulnak elő és ugyanitt a legjobbak a mágneses ellenállás paraméterek is. Kísérletek történtek több impulzussal történő Cu réteg leválasztására is abból a célból, hogy így más növekedési sajátságok alakulhassanak ki, mint a kétimpulzusos leválasztási módban és ezzel is befolyásolni lehessen a multirétegek mikroszerkezetét, ezen keresztül pedig a mágneses ellenállás viselkedést.

*Résztvevők: 8 kutató, ebből 7 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 50 MFt költségvetési támogatás, 4 MFt hazai pályázatok, 4 MFt hazai megrendelés.*

A metallurgiai kutatások keretében új, hőálló Al-alapú amorf ötvözet összetételt dolgoztak ki ( $Al_{85}Ta_6Ni_9$ ), amelynek a kristályosodási csúcshőmérséklete  $400\text{ }^\circ C$ , a legnagyobb az eddig ismert Al alapú fémüvegek között. Az összetételfüggő üvegeképző hajlamot a  $Cu_{100-x}Zr_x$  ötvözetsorozaton vizsgálták és kimutatták, hogy az  $x = 36$  legkedvezőbb összetételnél a „törekenységi” paraméternek minimuma, míg a redukált Kauzmann hőmérsékletnek maximuma van. Megkezdték a nagyentrópiájú, egyfázisú, szilárd oldatként megjelenő, 4-nél

több komponensű ötvözetek előállítását és vizsgálatát. A cél nagyszilárdságú, hőálló és könnyű szerkezeti anyag előállítása Al-Ti alapon.

Házilag kivitelezett mágneseres hőkezelő berendezéssel keresztirányú indukált anizotrópiát hoztak létre kobalttal dópolt FINEMET típusú nanokristályos, lágymágneses anyagokban. Így sikerült lapos és lineáris mágnesezési görbét előállítani, 100 000 és 1000 között változtatva az effektív permeabilitást a hőkezelési hőmérséklet, idő és mágneses tér változtatásával.

Egy korábbi GVOP pályázat keretében vásárolt műszerekre alapozott kvázi-DC hiszterográf segítségével az irodalomban elsőként mérték ki a Steinmetz-féle skálázási törvények alkalmazhatóságát ultra-lágymágneses, nanokristályos anyagokra. A kísérleti eredményeket a hiszterézis hiperbolikus modelljével illesztették.

4-5 mg-os minták egyidejű termomágneses és DTA mérésére alkalmas kísérleti eszközt fejlesztettek ki, amit főleg a martenzit-ausztenit átalakulás vizsgálatára lehet alkalmazni a ferromágneses emlékező ötvözetek esetében.

*Résztvevők: 5 kutató, ebből 4 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 36 MFt költségvetési támogatás, 7 MFt hazai pályázatok, 2 MFt hazai megrendelés.*

#### *Komplex folyadékok*

Ferroelektromos és antiferroelektromos folyadékkristály fázisokkal rendelkező új, aszimmetrikus banán alakú molekulákat állítottak elő.

Kiterjesztették az elektrokonvekció elméleti leírását a flexoelektromosság figyelembe vételével. Kísérletek és numerikus szimulációk segítségével megmutatták, hogy a flexoelektromosság nem csak a nemstandard elektrokonvekció fellépését, de a standard elektrokonvekció küszöbének szokatlan frekvenciafüggését is magyarázza.

Megmagyarázták, miért nem forognak a radiálisan orientált folyadékkristály cseppek cirkulárisan polarizált fény hatására.

Mágneses nanorészecskéket folyadékkristállyal elegyítve ferronematikus kolloidokat állítottak elő, melyek viselkedése erősen függ a nanorészecskék alakjától.

Összefüggést találtak a lejtőn lefolyó szemcsés anyagok lavináinak dinamikai jellemzői és a szemcsék alakja között.

A fenti kutatások a jelenségek mélyebb megértését szolgálják, az új anyagok előállításával kapcsolatos eredmények potenciális alkalmazási lehetőséget hordozhatnak.

*Résztvevők: 53 kutató, ebből 6 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 43 MFt költségvetési támogatás, 6 MFt hazai pályázatok.*

#### *Neutronspektroszkópia kondenzált anyagokban*

Az egyik kutatási terület az emberi szervezetben különböző károsodások során bekövetkező csonthiányok pótlására, mesterséges implantátumokhoz használt nagyszilárdságú biokerámiák kis energiaigényű szintetizálása és szerkezetvizsgálata. A magas hőmérsékletű olvasztásos



technológia kiváltása érdekében egy új, ún. szol-gél módszert fejlesztettek ki kalcium-szilikátok előállítására. Az új módszerrel elkerülhetők az olvadék lehűlésekor gyakran fellépő fázis-szeparációk. A szol-gél módszerrel előállított kerámiák biokompatibilitása lényegesen jobb, mint az olvasztottaké. A létrehozott tömbök kémiai és szupramolekuláris szerkezetét (fraktál szerkezet; aggregátumos szerkezet; kristály fázisok) neutron-, Röntgen- és fényeszközökkel határozták meg.

Egy másik alkalmazott kutatási területen a hidrogén tartalmú katalizátorok szerkezetét vizsgálták kisméretű neutronszórással, kihasználva ennek a módszernek az unikális képességét, az izotópok szórás-amplitúdó szerinti megkülönböztethetőségét (hidrogén és deutérium ill.  $^{63}\text{Cu}$  és  $^{65}\text{Cu}$ ). Cinkoxid-réz porokban megállapították, hogy a hidrogénben leggazdagabb tartományok a réz kiválások középpontjában és az ezek körül kialakuló héjban helyezkednek el, ami Cu-H kicserélődést előidéző elektrokémiai párok kialakulásához vezet, ezáltal elősegítve a hidrogénmolekulák felbomlását a metanol szintéziséhez szükséges atomi hidrogénre.

*Résztvevők: 38 kutató, ebből 13 az SZFKI munkatársa, 8 külföldi kutató, valamint 17 vendégkutató az EU FP6 "Access" program keretében. Anyagi ráfordítás: 94 MFt költségvetési támogatás, 62 MFt hazai és 18 MFt külföldi pályázatok, 8 MFt hazai megrendelés.*

#### *Neutronszórás*

A Reverse Monte Carlo (RMC) módszer alkalmazását követő geometriai analízissel bizonyították, hogy az ón-tetrajodid ( $\text{SnJ}_4$ ) folyadékfázisa az a szabályos tetraéder alakú molekulákat tartalmazó anyag, amelyben jelentős mennyiségben fordulnak elő „Apollo-párok”. Magas nyomáson (max. 5,2 GPa), szobahőmérsékleten végzett röntgendiffrakciós mérések értelmezése azt mutatta, hogy a szuperkritikus állapotban lévő oxigénben a szomszédos molekulák jól felismerhetően párhuzamos és „X”-alakú konformációkat alkotnak.

Neutron- és röntgendiffrakciós, valamint EXAFS adatokra támaszkodva kimutatták, hogy As-Te kovalens üvegekben teljesül a „8-N” szabály, amennyiben kevesebb, mint 50% arzént tartalmaz a minta. A  $\text{Co}_{43}\text{Fe}_{20}\text{Ta}_{5,5}\text{B}_{31,5}$  összetételű fémüveg szerkezetével kapcsolatban, neutron-, röntgendiffrakciós és EXAFS adatok RMC modellezésének eredményeképpen kapcsolatot találtak ezen amorf ötvözet kiemelkedő mechanikai stabilitása és az atomi szerkezet között. Üvegszerű alkáli-borátok szerkezetét neutrondiffrakcióval, illetve infravörös spektroszkópiával vizsgálva arra a következtetésre jutottak, hogy  $\text{Na}_2\text{O}$  hozzáadásának hatására az amorf  $\text{B}_2\text{O}_3$ -ban található  $\text{BO}_3$ -egységek egy része  $\text{BO}_4$ -tetraéderekké alakul.

A boroszilikátok szerkezetével kapcsolatos eredmények a későbbiekben esetleg gazdaságilag is hasznosulhatnak.

*Résztvevők: 15 kutató, ebből 7 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 50 MFt költségvetési támogatás, 5 MFt hazai pályázatok.*

#### *Lézerfény és szilárd anyag – főként nemlineáris – kölcsönhatásai*

Bebizonyították, hogy az intenzív lézerterek által fémfelületen kiváltott fotoelektronok de Broglie hullámok konstruktívan interferálnak, és ez attoszekundumos ( $10^{-18}\text{s}$ ) impulzussorozat eredményez. A fotoelektronáram attoszekundumos szerkezete egyes atomok vagy kondenzált rendszerek ultragyors relaxációs folyamatainak részletes

monitorozását teszi lehetővé, s ezzel a fizika sok más ágában is kiváló diagnosztikai eszközként használható. Javaslatot tettek ultragyors, kollimált elektronforrások előállítására felületi plazmonos elektrongyorsítás segítségével.

Továbbfejlesztették laboratóriumi eszközparkukat, többek között retardáló potenciál elven működő elektron-spektrométer megépítésével, illetve Ti:zafír lézerrendszerük pumpálólézérének cseréjével. Ezek eredményeképpen, elsőként meg tudták vizsgálni kevés optikai ciklusból álló lézerimpulzusokkal a plazmonos elektrongyorsítást, illetve újfajta fáziskorrigáló (csörpölt) tükrök rezonátoron belüli alkalmazhatóságát tesztelték.

*Résztvevők: 6 kutató, valamennyi az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 43 MFt költségvetési támogatás, 13 MFt hazai és 4 MFt külföldi pályázatok.*

#### *Gázlézerek és gázkisülések*

Molekuladinamikai szimulációs módszerekkel vizsgálták az erősen kölcsönható rétegelt sokrészecske-rendszerek szerkezeti, transzport és kollektív dinamikai tulajdonságait, illetve nemlineáris hullám-hullám kölcsönhatásokból eredő felharmonikus-keltést figyeltek meg. Feltárták a kétdimenziós Yukawa rendszerek anomális transzport jellemzőit. Részecske szimulációs módszerrel tanulmányozták rádiófrekvenciás gerjesztésű plazmákban az elektronok és ionok dinamikáját.

*Résztvevők: 11 kutató, ebből 9 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 64 MFt költségvetési támogatás, 11 MFt hazai és 23 MFt külföldi pályázatok, továbbá 6 MFt hazai megrendelés.*

#### *Lézeralkalmazások, amorf vékonyrétegek*

Optikai méréstechnika: Új mérési eljárást dolgoztak ki a felületi plazmonok időbeli statisztikájának mérésére, amely a kereszt-korrelációs függvények mérésén alapul. A kifejlesztett mérési eljárás alapján egy berendezést hoztak létre, amellyel a kereszt-korrelációs függvény, illetve a statisztikai eloszlási függvények mérhetők. Továbbfejlesztették a két hullámhosszú négydetektoros aeroszol spektrométer mérésvezérlő egységét, az adatgyűjtő és feldolgozó szoftvert, és létrehoztak egy önálló, hordozható berendezést, amely alkalmas az aeroszlok méreteloszlásának, koncentrációjának, törésmutatójának és abszorpciójának egyidejű, gyors meghatározására ~1 s-os mintavételezési idővel. 3 mérési kampány során környezetvédelmi célokra hasznosították a mobil aeroszolvérő laboratóriumot. Megépítették a TCSPC (time correlated single photon counting) mérő-rendszert az aeroszol minta kémiai kiértékelésére. Részt vesznek az ESFRI témacsoporthoz tartozó EU FP7 ELI-PP Infrastrukturális Nagyberendezés Létrehozása c. nemzetközi programban.

Amorf szén vékonyrétegek: A nano- és ultra-nanokristályos gyémánt filmek, a gyémánt nanoszemcsék, a szén alapú vékonyrétegek a modern technológia ígéretes anyagai, amelyek gyakorlati alkalmazása már számos területen valósult meg. Ezen anyagok kutatása további hasznosítási lehetőségek felismerésével kecsegtet. Kutatásaik során a nanokristályos gyémánt filmek kötősszerkezetének a feltérképezésére Raman szórás méréseket végeztek és egyedi kísérleti megoldást alkalmazva igazolták a gyémánt nanokristályok közti határréteg kötősszerkezetének változását a szemcsemérettel és meghatározták a határréteg domináns szerkezeti elemeit. Megmutatták, hogy a határrétegben a domináns szerkezeti elemek lokálisan változnak a pásztázott terület mentén. E felismerés jelentősége azzal függ össze, hogy a szemcsehatárok kötősszerkezete jelentősen befolyásolja a nanogyémánt vékonyrétegek

alkalmazás szempontjából fontos makroszkópikus tulajdonságait, így annak módosítása e tulajdonságok ellenőrzött változtatására ad módot.

*Résztvevők: 12 kutató, ebből 9 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 65 MFt költségvetési támogatás, 30 MFt hazai és 8 MFt külföldi pályázatok.*

#### *Femtosekundumos lézertechnika és optikai vékonyrétegek*

Az optikai vékonyréteg analógia alapján egydimenziós analitikus módszert dolgoztak ki fotonikus kristály optikai szerkezetek modellezésére, tervezésére. A Furukawa Electronic Technológia Intézet (FETI) munkatársai segítségével az egydimenziós modell alapján kapott eredményeiket összehasonlították a lényegesen számításigényesebb, végeelem módszeren alapuló 2D modell eredményeivel. Azt találták, hogy a modellparaméterek alkalmas megválasztása esetén az 1D modell megfelelő pontosan írja le a fotonikus kristályok spektrális tulajdonságait, és – a hullámvezetésből adódó diszperziót leszámítva – a megfelelően jellemzi az adott szerkezet alapvető diszperziós tulajdonságait. A módszert eredményesen alkalmazták mind szélessávú, üreges szerkezetű fotonikus kristályszálak tervezésére, mind üreges Bragg szálak diszperziós tulajdonságainak módosítására. Az így megtervezett szálak előnyösen alkalmazhatóak mind a most elterjedten használt, széles sávban hangolható femtosekundumos fényforrásokot alkalmazó mérőberendezések, mind a femtosekundumos lézerforrások új generációját jelentő femtosekundumos szállézeres és szálerősítők esetében. Jelenleg ez utóbbi technológián alapuló femtosekundumos lézer fényforrások fejlesztésén dolgozik az MTA SZFKI, az R&D Ultrafast Lasers Kft. és a Furukawa Electronic Technológiai Intézet által alkotott konzorcium. Sikerült egy ~10 ps-os impulzusokat előállító femtosekundumos Yb szállézer - szálerősítő rendszert kifejleszteniük, amely ~300 fs-os lézerimpulzusokat állít elő ~80 MHz ismétlési frekvencián ~1200 mW átlagteljesítménnyel.

Femtosekundumos lézerekészülékek rezonátorait alkotó sokréteges tükrök hordozói optikai polírozási technológiáját továbbfejlesztve 0,4 nm-nél kisebb felületi érdességű lézertükrök hordozókat állítottak elő BK7 optikai üvegből és Suprasil 1 ömlesztett kvarcüvegből. Fluoreszkáló fehérjékkel jelzett génmanipulált sejtek nagy hatásfokú optikai detektálására használható interferenciaszűrőket készítettek.

Nagy stabilitású osztótükrök bevonatokat fejlesztettek ki nagy teljesítményű technológiai lézerekészülékekhez, különös tekintettel a vékonyréteges napelemek gyártási technológiáiban történő alkalmazásokra.

*Résztvevők: 5 kutató, ebből 3 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 22 MFt költségvetési támogatás, 7 MFt hazai pályázatok.*

#### *Optikai egykristályok növesztése és minősítése*

Yb-mal adalékolt sztöchiometrikus összetételű LiNbO<sub>3</sub> kristályt növesztettek flux módszerrel, amelyben abszorpciós mérésekkel meghatározták az Yb<sup>3+</sup>-ionok teljes term diagramját. A <sup>4</sup>F<sub>7/2</sub>→<sup>4</sup>F<sub>5/2</sub> átmenet felhasadásából eltérő lokális környezetű Yb<sup>3+</sup>-ionokra következtek. Periódikusan polarizált doménszerkezetű LiNbO<sub>3</sub> kristályokat növesztettek aszimmetrikus Czochralski technikával. Megállapították, hogy a lézer-tűrőképesség javítására használt Mg-adalék rontja a doménszerkezetet, de Mg<sup>+</sup>Yb és Zr<sup>+</sup>Yb kettős adalékolással megfelelő lézertűrés és doménszerkezet érhető el.

$\text{Bi}_2\text{TeO}_5:\text{Yb,Tm}$  kettősen adalékolt kristályokat növesztettek Czochralski módszerrel. A kristályokban lumineszcencia mérésekkel energiaátadást azonosítottak mind a  $\text{Tm} \rightarrow \text{Yb}$  mind az  $\text{Yb} \rightarrow \text{Tm}$  irányokba. 980 nm-es gerjesztés után ( $\text{Yb } ^2\text{F}_{5/2}$ -szint) két nagyobb energiájú Tm-emissziót ( $^3\text{H}_4 \rightarrow ^3\text{H}_6$ ,  $^1\text{G}_4 \rightarrow ^3\text{H}_6$ ) figyeltek meg (fel-konvertálás), amelyek intenzitásfüggéséből 2- és 3-fotonos folyamatokat azonosítottak. A  $\text{Bi}_2\text{TeO}_5$  kristályok fotorefraktív tulajdonságainak javítására adalékolt kristályokat növesztettek. Megállapították, hogy a Ho javítja az érzékenységet, de egyidejűleg a telítési határfok csökkent. Oldalszervezésű digitális hologramokat írtak be  $\text{Bi}_2\text{TeO}_5$  kristályokba, és megállapították, hogy a hologram egyetlen ns-os lézerpulzussal is kiolvasható.

Pr-mal adalékolt  $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$  (YAB) kristályokat növesztettek flux módszerrel, és nagyfelbontású abszorpciós spektroszkópiával meghatározták a  $\text{Pr}^{3+}$ -ionoknak az áteresztő tartományba eső összes átmenetét a Stark komponensekkel.

A kristályok analitikai vizsgálatára kidolgozott atom-abszorpciós mérési technikákat eredményesen alkalmazták bor minták As, Cd, Cu és Pb tartalmának meghatározására, továbbá belgiumi levegő-szennyezettségi mérésekre, valamint krakkói műemlékek károsodását okozó szennyezések meghatározására.

A fenti kristályokat fejlesztők és alkalmazók lézertoptikai rendszerekben használják.  
*Részvevők: 13 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 57 MFt költségvetési támogatás, 2 MFt hazai pályázat és 10 MFt külföldi megrendelés.*

#### *Optikai kristályok karakterizációja és hibahelyeinek vizsgálata*

Széleskörű metodológiával jelentős eredményeket értek el az oxidkristályok tulajdonságainak leírásában és alakításában, elősegítve azok gyakorlati alkalmazását. Energia diszperzív röntgen-spektroszkópiai és transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatokkal 200-1500 nm szélességű vonalas hibaszerkezetet mutattak ki ion-vékonyított YAB kristályokban. Intenzív lézertényel  $\text{LiNbO}_3$  egykristályokban keltett töltéshordozók keletkezését és rekombinációját időfelbontott abszorpciós spektroszkópia segítségével vizsgálták. Kimutatták, hogy a keletkező elektron- és lyuk-polaronok 0,4 ms élettartamát a Mg adalék 2-3 nagyságrenddel csökkentti, ami magyarázza a sugársérüléssel szembeni megnőtt ellenállást. A fotorefraktív küszöb feletti koncentrációban Mg-mal adalékolt  $\text{LiNbO}_3$  kristályokban jelenlévő OH<sup>-</sup> ionok termikus aktivációs energiájára 0,26 eV értéket kaptak.  $\text{K}_3\text{Li}_2\text{Nb}_5\text{O}_{15}$  kristályokban kimutatták, hogy az alkáli adalékok közül a Na Li-helyre, a Cs K-helyre épül be, és míg a Na rontja, a Cs javítja a kristályok minőségét.

A neutronos szerkezetvizsgálatban detektorként és a sugárvédelemben szövet-ekvivalens doziméterként alkalmazható lítium tetraborát ( $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ ) egykristályokban elektronspin-rezonancia és optikai spektroszkópia segítségével jellemezték a Cu aktivátor különböző töltésállapotait ( $\text{Cu}^+$  és  $\text{Cu}^{2+}$ ) és atomi környezetüket. Hidroxidionok rezgési sávjait azonosították és jellemezték nagyfelbontású infravörös abszorpcióval YAB és  $\text{CdWO}_4$  kristályokban. Meghatározták a hexagonális szerkezetű multiferroikus  $\text{ErMnO}_3$  és  $\text{TmMnO}_3$  antiferromágneses rendeződési hőmérsékletét ( $T_N \approx 76$  ill. 83K). Számítógépes programot fejlesztettek ki vassal adalékolt  $\text{LiNbO}_3$  kristályokba írt holografikus rácsok interferenciamikroszkóppal készült interferogramjainak kiértékelésére, lehetővé téve a fázisrács törésmutató-modulációja amplitúdójának nagy pontosságú meghatározását. Er-mal

adalékolt tellurit üveg mintákba  $N^+$  ionok implantálásával sík hullámvezetőket készítettek és azokat az alacsony dózisú tartományokban is ( $5 \times 10^{12}$  ion/cm<sup>2</sup> -ig) gát típusúnak találták. Meghatározták a hőkezelés hatását a hullámvezető módusok effektív törésmutatójára.

*Résztevők: 30 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 57 MFt költségvetési támogatás, 2 MFt hazai pályázatok.*

### *Kvantumoptika és kvantuminformatika*

Tanulmányozták a Bose-Einstein kondenzátum térbeli önszerveződését nagy fineszű lineáris optikai üregrezonátorban. Az oldalirányból lézerrel gerjesztett kondenzátumbeli atomok fotonokat szórnak az üregbe. Egy kritikus pumpaintenzitás fölött a homogén kondenzátum stabil mintázatba rendeződik, amelyet az üregben lévő mező határoz meg. Analitikusan meghatározták az átmeneti pontot, átlagtér elmélet segítségével. Kiszámították a legelső Bogoljubov gerjesztéseket és a kvantumos kiürülést.

Atomi rendszer impulzusmomentum-állapotaiból álló, degenerált energianívójú rendszerre kidolgozták az elektromágnesesen indukált átlátszóság (EIT) folyamat modelljét. Rögzített atomi koherens szuperponált állapot mellett az erős csatoló tér polarizációs állapotának változtatásával elérhető, hogy az atomokból álló közeg teljesen átlátszó vagy áteresztő legyen.

Általánosították a Pólya-féle szám fogalmát kvantumos bolyongásokra. Ellentétben a klasszikus bolyongással, a kvantumos Pólya-féle szám nemcsak a rács dimenziójától, hanem az érmeoperátortól és a kezdőállapottól is függ. Példát adtak tetszőleges dimenzióban visszaterő, illetve alacsony dimenziós elszökő bolyongásra.

Vizsgálták félvezetőkben kialakított kvantumgyűrűkből képzett (több be- és kimenetű) négyzetes rácsok vezetőképességét Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás és merőleges mágneses tér, valamint az egyes gyűrűk közé helyezett pontszerű szórócentrumok jelenlétében. Megmutatták, hogy ilyen eszközök segítségével, az elektron spinje nemtriviális módon transzformálható. A spin-pálya kölcsönhatás lokális változtatásával megmutatták, hogy az áram adott kimenetre irányítható, illetve, hogy az eszköz bizonyos esetekben a Stern-Gerlach berendezés analógiájának tekinthető.

*Résztevők: Összesen 36 kutató, ebből 12 az SZFKI munkatársa. Anyagi ráfordítás: 86 MFt költségvetési támogatás, 12 MFt hazai pályázatok.*

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

### *Hazai kapcsolatok*

Az intézet kutatásai során széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésre támaszkodik. Történelmi előzmények, tematikai hasonlóságok és a közös infrastruktúra használata folytán legszorosabb kapcsolatai a telephelyen működő akadémiai intézetekkel vannak. Mindez számos témában tudományos együttműködést jelent, de hozzá tartozik a közös elhelyezésből adódó feladatok teljesítése is. Az intézet feladata a telephelyen levő akadémiai intézetek és más szervezetek könyvtári igényeinek kielégítése, a közös műszaki könyvtár működtetése.

Az intézet különböző hazai pályázatok megvalósításán dolgozott, konzorciumok tagjaként. Az együttműködő szervezetek között voltak akadémiai intézetek (MFA, KFKI-AEKI), egyetemi tanszékek (a BME-ről, a Szegedi, illetve a Pécsi Tudományegyetemről), innovatív vállalatok (TECHNORG–LINDA Kft., MAGNETEC Ungarn Kft. és a Tommy Invest Elektronikai Kft.) és kis spin-off cégek (R&D Ultrafast Lasers Kft., OPTILAB Műszaki Fejlesztő és Szolgáltató Kft.).

#### *Nemzetközi kapcsolatok*

Az intézetnek a kutatás minden területén élő kapcsolatai vannak európai és tengerentúli egyetemekkel és kutatóintézetekkel. A 2008-ban megjelent idegen nyelvű publikációk 2/3 részében legalább az egyik társszerző külföldi. Az intézet munkatársai nemzetközi rendezvényeken 119 tudományos előadást tartottak és 95 posztert mutattak be.

A kapcsolattartás formái közé tartoztak a rövid idejű látogatások, a hosszabb idejű külföldi ösztöndíjak és munkavállalások, vendégkutatók fogadása, továbbá közös workshopok és iskolák szervezése.

A hosszabb idejű külföldi tartózkodások különösen a fiatal kutatók szakmai fejlődése, nemzetközi kapcsolataik építése szempontjából fontosak. A kutatók külföldi munkavállalása az előző évekhez hasonlóan alakult. 16 kutató töltött hat hónapot meghaladó időt külföldön, közülük 13 több, mint egy évet.

Az intézetben 17 külföldi vendégkutató dolgozott összesen 25 hónapot, egy hónapnál hosszabb tartózkodás formájában.

Az intézet két workshopot szervezett önállóan: *New Challenges in the Electronic Structure of Complex Materials* (40 résztvevő 10 országból) címmel, továbbá az *European Spallation Source* projekt előkészítésének aktuális kérdéseiről (35 résztvevő 8 országból). A Szegedi Tudományegyetemmel közösen szervezett *4th Szeged International Workshop on Advances in Nanoscience* rendezvényen a 150 résztvevő a tudományterület fejlődésének aktuális kérdéseit tekintette át.

Az intézet kutatói számos mobilitás típusú tematikus nemzetközi együttműködésben vettek részt. Az MTA egyezményeken alapuló kétoldalú tematikus együttműködések elsősorban az akadémiai intézetekkel való kapcsolattartást teszik lehetővé. Kétoldalú akadémiai megállapodások alapján 14 ország kutatóival 26 témában folytattak közös kutatásokat. Egyik munkatársuk elnyerte a Szlovák Tudományos Akadémia 2008 évi Nemzetközi Díját, szlovák kutatókkal az amorf lágymágneses anyagok kutatásában elért kiemelkedő eredményeiért. Az intézet egyik osztálya több éve folytat közös kutatásokat a Pármai Egyetem kutatóival optikai egykristályok növesztése és tulajdonságainak kutatása területén. Korábban a kutatásokhoz használt egykristályokat a magyar fél állította elő. Az elmúlt évben az olasz egyetem az intézettől rendelt meg egy hazai fejlesztésű kristálynövesztő berendezést.

A TÉT együttműködések a külföldi egyetemekkel folytatott közös kutatásokat segítették elő, de hasznosnak bizonyultak a PhD képzésben megvalósuló együttműködések szempontjából is. Az intézet 2008-ban 7 ország 10 kutatócsoportjával folytatott közös kutatásokat. TÉT együttműködések keretében.

A fenti együttműködések egészíti ki egy MTA-NSF és két nemzetközi együttműködésben megvalósuló OTKA projekt, továbbá két bilaterális egyezmény alapján folytatott kutatás is. A német Max-Planck-Institut für Quantenoptik (München-Garching) intézettel sikeres kutatások folynak az ultragyors fény-anyag kölcsönhatások kísérleti és elméleti vizsgálata terén. A Service de Physique de 1, État Condensé (CEA-Saclay, Franciaország) egyik vezető munkatársa irányítja az intézetben folyó alacsonyhőmérsékletű kutatásokat.

#### *Felsőoktatás*

Az intézet munkatársai több egyetemen vesznek részt a graduális és posztgraduális képzésben a szilárdtestfizika és az optika tárgykörében. Különösen szoros a kapcsolat az ELTE TTK-n folyó fizikus- és a BME TTK-n folyó mérnök-fizikusképzéssel, továbbá a PTE Fizikai Intézetében folyó oktatással. Utóbbi Intézet igazgatója az SZFKI vezető kutatója. Munkatársaival együtt jelentős szerepet vállal az elméleti fizika és az informatika pécsi oktatásában.

2008-ban az intézet 46 kutatója vett részt az egyetemi oktatásban, összesen 1791 órában, rendes és speciális előadások tartása, továbbá szemináriumok és laborgyakorlatok vezetése formájában. Az intézetben 5 diplomamunka készült el és 3 PhD-értekezést védtek meg. 28 doktori ösztöndíjas dolgozott disszertációja elkészítésén.

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

A kutatások anyagi fedezetét – az alapellátáson túlmenően – 2008-ban is a korábban elnyert hazai és nemzetközi, továbbá vállalati megbízások biztosították. A pályázatok szerződésállománya összesen 361 MFt-ot tett ki, mely összeg legnagyobb hányadát (39%) a nemzetközi projektek alkották. Ezt követték az OTKA (34%) és az egyéb (főleg NKTH) által finanszírozott projektek (27%).

A nemzetközi projektek fele a 2007-ben indult EU 7. Keretprogramjához kapcsolódott. Az intézet eddig 5 pályázaton volt eredményes az új keretprogramban. Közülük külön említést érdemel két olyan sok-résztvevős projekt, mely egy-egy európai nagyberendezés létrehozásának előkészítésére irányul. A *Preparatory activities for the implementation of the European X-ray free electron laser facility (X-FEL)* projekt egyik kiemelt mérőállomása (az egyedi molekulák atomi szerkezetének meghatározását célzó állomás) tudományos programjának végrehajtásában az intézet röntgendiffrakciós csoportja vezető szerepet tölt be. A másik megaprojekt (*Extreme light infrastructure preparatory phase, ELI*) megvalósításában magyar részről két akadémiai intézet és három egyetemi tanszék vesz részt. Tevékenységüket az SZFKI koordinálja. A különösen drága berendezések megépítése és későbbi üzemeltetése nemcsak szokatlan, új technikai feladatok megoldását igényli, hanem a megfelelő pénzügyi és jogi szabályozás részleteinek kidolgozását is.

Az intézet egyik kutatócsoportja nemzetközileg elismert kutatásokat folytat fémolvadékok különböző körülmények között végbemenő megszilárdulása területén, az Európai Űrkutatási Ügynökség (European Space Agency, ESA) finanszírozásával. 2008-ban az intézet kutatói két ESA projekt kidolgozásában vettek részt.

Az alap kutatások finanszírozása főleg OTKA-támogatással történt. 2008-ban az intézet kutatói 49 OTKA-projekt megvalósításán dolgoztak. Az éves szerződésállomány 123 MFt-ot tett ki. A 2008-ban elnyert OTKA-projektek száma és a támogatás összege az előző évekéhez képest csökkent.

Ugyanez érvényes az NKTH által meghirdetett pályázatokra is. Az intézet konzorciumi tagként 3 olyan K+F projektben vett részt, melyet különböző kft.-k kezdeményeztek (R&D Ultrafast Laser Kft., Mirrotron Kft., HILASE Kft.). Egy korábbi projekttel együtt 98 MFt volt ezen pályázatok éves szerződésállománya.

Az intézet nem pályázati formában, különböző vállalatok részére nyújtott szolgáltatást (pl. az egyik gyógyszergyár részére bonyolult molekulák szerkezetének felderítése, mágneses mérések végzése több kft. megbízásából). A nem pályázati külső megrendelésekből származó árbevétel 5 év alatt 200 MFt volt, évenként emelkedő tendenciával (2003-ban 10 MFt, 2007-ben 70 MFt).

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

1. Kim EH, Legeza Ö, Sólyom J: Topological order, dimerization, and spinon deconfinement in frustrated spin ladders, *Phys Rev B*, 77, 205121/1-16 (2008)
2. Iglói F, Juhász R: Exact relationship between the entanglement entropies of XY and quantum Ising chains, *Europhys Lett*, 81, 57003/1-6 (2008)
3. Sütő A, Szépfalusy P: Variational wave functions for homogenous Bose systems, *Phys Rev A*, 77, 023606/1-14 (2008)
4. Kádas K, Vitos L, Ahuja R, Johansson B, Kollár J: Temperature dependent elastic properties of  $\alpha$ -beryllium from first principles theory, *Phys Rev B*, 76, 235109/1-6 (2007)
5. Laukkanen P, Punkkinen MPJ, Komsa HP, Ahola-Tuomi M, Kokko K, Kuzmin M, Adell J, Sadowski J, Perälä RE, Ropo M, Rantala TT, Väyrynen IJ, Pessa M, Vitos L, Kollár J, Mirbt S, Johansson B: Anomalous bismuth-stabilized (2x1) reconstructions on GaAs(100) and InP(100) surfaces, *Phys Rev Lett*, 100, 086101/1-4 (2008)
6. Kiss LF, Kemény T, Bujdosó L, Bakonyi I, Baskoutas S, Pouloupoulos P, Kapaklis V, Politis C: Heterogeneous magnetism in Fe-doped bulk-amorphous and nanostructured Pd-based alloys, *J Phys: Condens Matter*, 20, 015211/1-8 (2008)
7. Pusztai T, Tegze G, Tóth GI, Környei L, Bansel G, Fan Z, Gránásy L: Phase-field approach to polycrystalline solidification including heterogeneous and homogeneous nucleation, *J Phys: Condens Matter*, 20, 404205-1-16 (2008)
8. Thirunavukkuarasu K, Kuntscher CA, Nagy BJ, Jalsovszky I, Klupp G, Kamarás K, Kováts É, Pekker S: Orientational ordering and intermolecular interactions in the rotor-stator compounds C60•C8H8 and C70•C8H8 under pressure, *J Phys Chem C*, 112, 17525-17532 (2008)
9. Krekhov A, Pesch W, Éber N, Tóth-Katona T, Buka Á: Nonstandard electroconvection and flexoelectricity in nematic liquid crystals, *Phys Rev E*, 77, 021705/1-11 (2008)



10. Jánossy I: Electromagnetic torque and force in axially symmetric liquid crystal droplets, *Optics Letters*, 33, 2371–2373 (2008)
11. Börzsönyi T, Halsey TC, Ecke RE: Avalanche dynamics on a rough inclined plane, *Phys Rev E*, 78, 011306/1-15 (2008)
12. Pallinger Á, Sas B, Pethes I, Vad K, Williams FIB, Kriza G: Breakdown of the Bardeen-Stephen law for free flux flow in  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ , *Phys Rev B*, 78, 104502/1-5 (2008)
13. Bakonyi I, Péter L, Horváth ZE, Pádár J, Pogány L, Molnár G: Evolution of structure with spacer layer thickness in electrodeposited Co/Cu multilayers, *J Electrochem Soc*, 155, D688-D692 (2008)
14. Szöllösi E, Bokor M, Bodor A, Perczel A, Klement É, Medzihradsky KF, Tompa K, Tompa P: Intrinsic structural disorder of DF31, a Drosophila protein of chromatin decondensation and remodeling activities, *J Proteome Res*, 7, 2291-2299 (2008)
15. Almásy L, Turmine M, Perera A: Structure of aqueous solutions of ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate by small-angle neutron scattering, *J Phys Chem B*, 112, 2382-2387 (2008)
16. Temleitner L, Pusztai L, Akahama Y, Kawamura H, Kohara S, Ohishi Y, Takata M: Orientational correlations in high-pressure fluid oxygen and nitrogen, *Phys Rev B*, 78, 014205/1-6 (2008)
17. Dombi P, Rácz P: Ultrafast monoenergetic electron source by optical waveform control of surface plasmons, *Optics Express*, 16, 2887, 2008, "Research Highlight"-ként a Nature Photonicsban is bemutatva, 2, 206-207 (2008)
18. Varró S, Farkas Gy: Attosecond electron pulses from interference of above-threshold de Broglie waves, *Laser and Part Beams*, 26, 9-19 (2008)
19. Feldmann JD, Kalman GJ, Hartmann P, Rosenberg M: Ground state of magnetic dipoles on a two-dimensional lattice: structural phases in complex plasmas, *Phys Rev Lett*, 100, 085001/1-4 (2008)
20. Várallyay Z, Saitoh K, Fekete J, Kakihara K, Koshiba M, Szipőcs R: Reversed dispersion slope photonic bandgap fibers for broadband dispersion control in femtosecond fiber lasers, *Optics Express*, 16, 15603-15616 (2008)
21. Horn W, Földvári I, Denz C: Holographic data storage in photorefractive bismuth tellurite, *J Phys D: Appl. Phys*, 41, 224006/1-9 (2008)
22. Corradi G, Nagirnyi V, Kotlov A, Watterich A, Kirm M, Polgár K, Hofstaetter A, Meyer M: Investigation of Cu doped  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$  single crystals by EPR and time-resolved optical spectroscopy, *J Phys: Condens Matter*, 20, 025216/1-9 (2008)
23. Stefanak M, Jex I, Kiss T: Recurrence and Pólya number of quantum walks, *Phys Rev Lett*, 100, 020501/1-4 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	168	Ebből kutató <sup>2</sup> :	111
PhD, kandidátus:	55	MTA doktora:	28
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	1
		rendes tag:	4
			46
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			222
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			217
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	157
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	39
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	368,215	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	2587
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2083
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	6
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	2	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	2	<i>ebből</i> külföldön:	2
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	119	posztterek száma <sup>10</sup> :	95
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			46
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát:	25
		PhD-t:	28
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			1791
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			998 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	14	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	391 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			49
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	123 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			4
NKFP:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	57 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	41 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			14
EU-forrásból:	13	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	138 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			6
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI  
TÁMOGATOTT TANSZÉKI KUTATÓHELYEK



## BME ALKALOIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Huszthy Péter, az MTA doktora  
1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.  
Telefon: 463-1071, Fax: 463-3297  
e-mail: huszthy@mail.bme.hu

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

Folytatják gyógyszeripari együttműködésben a különböző indol-származékok és biológiailag jelentős természetes anyagok és azok származékainak előállítását. Vizsgálják az új, citosztikus hatású vegyületek szintézisét, melynek során a vindolint és a vinblasztint aminosavakkal kapcsolják össze. A dezmetoxi-galanthamin szintézise során előállítják a fontosabb *Amaryllidaceae* alkaloidokra jellemző tetraciklust.

*Források: OTKA 1,5 millió Ft, Richter Gedeon Nyrt. megbízás: 11,5 millió Ft*

A korábbi kutatómunkát folytatva céljuk a héttagú D-gyűrűt tartalmazó iboxifillin nevű alkaloid felépítése intramolekuláris [4+2]cikloaddíció kulcslépéssel. Szintézisstratégiát dolgoznak ki a 19-hidroxi-20-epipandolin racionális felépítésére is.

*Források: OTKA 1,9 MFt*

Folytatják az új fényvédő hatású anyagok kutatását. Eljárásokat dolgoznak ki új szerotonin antagonisták és agonisták több gyűrűs izokinolin, kinolin, és oxazinopiridazin vázas vegyületek előállítására.

*Források: ISDIN 8,3 MFt, Bayer CropScience, Bábolna Környezetbiológiai Közp. 6,5 MFt*

Folytatják biokatalizátorok kifejlesztését és alkalmazását szerves szintézisekben, elsősorban enantiomertiszta királis kulcs-intermedierek előállítására. Továbbfejlesztik a hatékony, környezetbarát eljárások alkalmazását folyamatos reaktor rendszerekben is. Integrált multienzimikus/kemoenzimatikus rendszereket kívánják alkalmazni, fejleszteni. A kémiai reakciók és az enzimműködés/receptor kötés mechanizmusait modern számításokkal kívánják alátámasztani.

*Források: OTKA 3,4 MFt, NKFP-07-A2 FLOWREAC 25 MFt*

Folytatják a piridin és akridin egységet tartalmazó olyan új enantiomertiszta koronaéter származékok előállítását, amelyek kovalens kötésekkel szférikus HPLC minőségű szilikagélhez köthetők. Az így kapott királis állófázisok segítségével racém protonált primer aminokat, aminosavakat és azok származékait tervezik rezolválni oszlopkromatográfiás úton. Folytatják a koronaéter alapú új szenzormolekulák kifejlesztését is, amelyek a biológiai szempontból fontos szervetlen és szerves ionok analitikájában alkalmazhatók.

*Források: OTKA 4,9 MFt + 2 MFt*

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

A kutatócsoport által kidolgozott és a Richter Gedeon Nyrt. által ipari méretekre nagyított szintézissel gyártott és forgalmazott két készítmény, a Cavinton (kb. 17,5 milliárd Ft) és a Fluconazol (kb. 4,5 milliárd Ft) forgalmi értéke 2008-ban együttesen mintegy 22 milliárd Ft volt. Mindkét eljárás számos szabadalommal védett, amelyekben a kutatócsoport tagjai nevesítve találhatók. A prosztanoid értékesítés a Chinoi-Sanofi gyár részéről elérte a kb. 6 milliárd Ft-ot. A rákellenes terápiában alkalmazott vinblasztint aminosavval összekapcsolva, majd a molekulát oligopeptiddel konjugálva sikerült olyan új származékot szintetizálni, amely szelektíven hat az osztódó sejtre.

5 fő, ebből 1,3 kut.csop. tag. Pályázati forrás: 750 eFt (OTKA).

Sikerült előállítani az *Amaryllidaceae* alkaloidokra jellemző benzofurobenzazepin tetraciklust, amely igazolta a korábban kidolgozott szintézis stratégia helyességét.

4 fő, ebből 1,3 kut.csop. tag. Pályázati forrás: 750 eFt (OTKA).

Kiemelkedő eredményeket értek el a pszeudoaszpidosperma családba tartozó, héttagú D-gyűrűt tartalmazó iboxifillin és 20-epimerje előállításával. A 19-hidroxi-20-epipandolin felépítése kapcsán nem a várt alkaloidot nyerték, hanem attól eltérő molekulát. Számításokkal igazolták, hogy a kulcsreakció nem a korábbiakban feltételezettek szerint koncertikusan megy végbe, hanem lépésenként valósul meg, aminek eredménye a váratlan termék keletkezése.

3,5 fő, ebből 0,5 kut.csop. tag. Pályázati forrás: 3213 eFt (OTKA)

Eljárásokat dolgoztak ki a várhatóan észterázenzim-gátló hatású furo[2,3-f]izokinolinok, furo[3,2-f]kinolinok és furo[3,2-h]kinolinok előállítására. Eljárást dolgoztak ki az Alzheimer-kór kezelésében használatos phisostigmin és fenszerin carba analogjainak szintézisére. Feltártak több heterociklusos rendszeren lejátszódó összetett szigmatróp átrendeződést és sikerrel alkalmazták több gyűrűs új kinolin és izokinolin származék előállítására.

3 fő, ebből 1,5 kut. csop. tag, Bayer CropScience. 7,0 MFt.

Nagyításra alkalmas eljárást dolgoztak ki kártevő rovarfajok szexferomonjának előállítására.

2 fő, ebből 2 kut. csop. tag, Bábolna Környezetbiológiai Központ: 1 MFt.

Enzimkatalizált eljárást dolgoztak ki ciklohexándiolok enantiomer és diasztereomer elválasztására, eukaliptusz fafélék őrleményeinek tisztítására és a fényvédő hatású Mexoryl típusú vegyületek szintézisére.

3 fő, ebből 1,5 kut. csop. tag, ISDIN Gyógyszergyár: 9,5 MFt.

Új biokatalizátorok előállítását valósították meg mikroorganizmusok szilárd fázisú fermentációjával és vizsgálták kereskedelmi lipázok módosítását. Megvalósították 1-heteroariletanolok, ill. 4-aril- és 4-heteroarilbut-3-én-2-olok biokompatibilis előállítását. Vizsgálták racém szekunder alkoholok folyamatos reaktorokban végzett lipáz-katalizált kinetikus rezolválását. Az alkoholok abszolút konfigurációjának meghatározására QM/MM számításokat alkalmaztak.

5 fő, ebből 1 kut. csop. közreműködő. Pályázati forrás: 3,4 MFt (OTKA), 25,0 MFt (NKFP)

Élettani szempontból fontos fémionok szelektív kimutatására akridon, illetve *N*-metilakridon fluorofor jelzőegységgel rendelkező új azakoronaéterek 2 csoportját szintetizálták; ezek közül egyikben egy monoaza-koronaéterhez egy akridon, ill. egy *N*-metilakridon egység kapcsolódik, a másikban pedig két monoaza-koronaétert egy akridonegység kapcsol össze. Az utóbbiak ún. „szendvics komplex” képződésével nagyobb szelektivitást mutathatnak. Két *i*Bu-csoporttal szubsztituált optikailag aktív tetraetilén-glikol-ditozilát és akridin-4,5-diol makrociklizációjával új enantiomertiszta lipofil akridino-18-korona-6 étert állítottak elő, melyet ionszelektív membrán-elektrodba beépítve sikeresen alkalmaztak protonált primer aralkil aminok enantiomerjeinek megkülönböztetésére vizes oldatban. Alkil-diarilfoszfinát és diarilfoszfinsav egységet tartalmazó új típusú szenzor és szelektormolekulákként alkalmazható, lipofil koronaétereket állítottak elő és behatóan tanulmányozták azok röntgenszerkezetét és komplexképződését. Várhatóan fontos élettani hatással rendelkező 5,7-diazaindol származékokat szintetizáltak.

6 fő, ebből 4 kut. csop. tag. Források: OTKA 4,9 MFt + 3,3 MFt (EGIS 1,5 MFt).

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Együttműködő partnereik: MTA KKKI, Richter Gedeon Nyrt., EGIS Nyrt. és a Sanofi-Aventis (Chinoïn) Gyógyszergyár. A citosztatikus hatású vegyületeket az MTA-ELTE

Peptidkémiai Kut. Cso.) és az MTA-SE Peptidbiokémiai Kut. Cso. vizsgálja. Kutatási kapcsolatban állnak a Servie új budapesti kutatóintézetével és a Bábolna Környezetbiológiai Központtal. Együttműködnek a kolozsvári Bábes-Bolyai és a portugáliai Beira Interior Egyetemen (Covilna), az ISDIN Gyógyszergyárral (Barcelona), és a Bayer CropScience Kutató Központtal (Frankfurt). Az új biokatalizátorok fejlesztését a BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékével együttműködve vizsgálták. Együttműködnek a ThalesNano Zrt munkatársaival és enzimekkel kapcsolatos kutatásaik során a Department of Organic Chemistry, „Politehnica” University of Timisoara (Románia), valamint az Institute of Organic Chemistry, University Karlsruhe (Németország) kutatócsoportjaival. A koronaéterekkel végzett cirkuláris dikroizmus (CD) méréseket és a kvantumkémiai számításokat az ELTE Kémiai Int.-tel, a röntgendiffrakciós vizsgálatokat az MTA KK Kémiai Int. kutatóival együttműködve végezték. A koronaéterek szelektivitásának fotofizikai módszerekkel történő meghatározásában és a koronaéter-alapú enantiomertiszta membrán-elektrodokkal végzett vizsgálatokban az MTA-BME Műszeres Kémiai Analitikai Kut. Cso. kutatóival működtek együtt.

A kut.cso.-ból 4-en minden félévben kötelező tantárgyakat adnak elő, 4 fő pedig minden félévben laboratóriumi gyakorlatokat vezet.

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

A tárgyévben folytatták a K68734, T48854, T046060 és K62654 számú OTKA kutatást és elnyerték a PD71910 számú OTKA-pályázatot. A 2007 évben kiírt Jedlik pályázaton a ThalesNano Zrt vezetésével az *NKFP 07 A2 FLOWREAC* konzorcium (ThalesNano Zrt, BME Szerves Kém. és Techn. Tanszék, ComerGen Zrt, ComGrid Kft, MOL Nyrt, Pannon Egyetem, Kémia Intézet Szerves Kémia Intézeti Tanszék) 430 MFt ösztámogatást nyert el a 2008-tól 2010-ig terjedő időszakra. A kutatócsoport közreműködő tagja témavezetésével és egy kut.cso.tag részvételével ebből 75 MFt támogatás áll rendelkezésre.

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

1. Tóth F, Oláh J, Kalaus Gy, Greiner I, Szöllősy Á, Gömörly Á, Hazai L, Szántay Cs Synthesis of vinca alkaloids and related compounds. Part 110. A new synthetic method for the preparation of pandoline-type alkaloid-like molecules *Tetrahedron* 64: 7949-7955 (2008)
2. Nemes A, Czibula L, Szantay Cs, Jr., Gere A, Kiss B, Laszy J, Gyertyan I, Szombathelyi Zs, Szantay Cs Synthesis and Evaluation of 2'-Hydroxyethyl trans-Apovincamate Derivatives as Antioxidant and Cognitive Enhancer Agents *J. Med. Chem.* 51: 479-486 (2008)
3. Király I, Hornyánszky G, Kupai K, Novák L Synthesis of Cycloalkanoindoles, the Carba Analogs of Physostigmine *Heterocycles* 75: 43-56 (2008)
4. Tosa M, Pilbak S, Moldovan P, Pais Cs, Szatzker G, Szakacs Gy, Novák L, Irimie F-D, Poppe L\* Lipase-catalyzed kinetic resolution of racemic 1-heteroarylethanol – experimental and QM/MM study *Tetrahedron Asymmetry* 19: 1844-1853 (2008)
5. Huszthy P, Farkas V, Tóth T, Székely Gy, Hollósi M Synthesis and preliminary studies on novel enantiopure crown ethers containing an alkyl diarylphosphinate or a protonizable diarylphosphinic acid unit, *Tetrahedron* 64: 10107-10115 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	7,43	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,7
PhD, kandidátus: 2	MTA doktora: 4	levelező tag: 0	rendes tag: 1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			19
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			18
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0	idegen nyelven:		16
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 2	idegen nyelven:		0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 33,148	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		221
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			107
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 2		<i>ebből</i> külföldön: 2	
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 9		poszterek száma <sup>10</sup> : 6	
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		6
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 7	Diplomamunkát: 11	PhD-t:	10
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			1667
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			34 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 1	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		74,8 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			15,4 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		25 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			2
EU-forrásból: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		16,5 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			7
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			17,9 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt



## BME ANYAGSZERKEZETI ÉS MODELLEZÉSI KUTATÓCSOPORT

Hargittai István, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Gellért tér 4.  
Telefon 463-1286, Fax: 463-4052  
e-mail: istvan.hargittai@gmail.com

### I A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Szerves és szervetlen vegyületek szerkezeti és rezgési spektroszkópiai vizsgálata. Intelligens anyagok kategóriájába tartozó új típusú kémiai gélek előállítása, szerkezeti és termodinamikai paramétereinek vizsgálata. Új anyagátadási műveletek optimalizáló modelljének és algoritmusának megalkotása, fejlesztése. A sejtműködésben meghatározó fehérje-hálózatok intermolekuláris kölcsönhatásainak felderítése.

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

*Molekulaszerkezet kutatások.* Megállapították, hogy az elfogadott elképzeléssel ellentétben a lantanida-trihalogenidek dimer molekuláinak szerkezete függ a 4f pálya betöltöttségétől, szemben a monomer molekulákkal, melyeké nem függ. Magyarázatot is adtak erre a jelenségre. Kimutatták ezen dimerek antiferromágneses tulajdonságát. Az első átmenetifém sor dihalogenidjeinek szerkezetvizsgálata során, a kvantumkémiai számítások és magas hőmérsékletű elektrondiffrakciós kísérleti adatok együttes analízisével bizonyítékot találtak a Renner-Teller hatás jelentkezésére ezen molekulákban. A króm-diklorid esetében a molekula torzulása statikus és a kísérleti adatokban is egyértelműen kimutatható, míg a króm-difluoridban a jelenség dinamikus. A króm-diklorid gőzében a monomer molekulák mellett kisebb molekula-klaszterek is léteznek, amelyek szerkezete hasonlít a kristályfázisban megvalósuló szerkezethez, tehát ezek a klaszterek a kristályosodás folyamatának első lépéseként foghatók fel. Ugyancsak megállapították, hogy ezek a klaszterek antiferromágneses tulajdonságúak, hasonlóan a kristályhoz. Az eredményeket 5 fő kutató és egy szaktechnikus érte el (2+1 fő TKI) kb. 6 MFt kutatócsoporti (ebből kb. 600 eFt pályázati) ráfordítással.

Kvantumkémiai számításokkal meghatározták a  $\text{ThC}_2$  és  $\text{ThC}_4$  molekulák szerkezetét melynek során kimutatták az irodalomban eddig  $\text{ThC}_4$ -re feltételezett szerkezet téves voltát. Multireferenciás kvantumkémiai módszerek alkalmazásával kiszámították az amerícium és kúrium oxidok elektronszerkezetét, disszociációs energiáját és egyéb molekuláris paramétereit. A meghatározott molekuláris tulajdonságok szolgálnak alapul a nukleáris technikában fontos vegyületek termodinamikai tulajdonságainak meghatározásához. Az eredményeket 3 fő (1 fő TKI) érte el, kb. 3.0 MFt kutatócsoporti (ebből kb. 800 eFt pályázati) ráfordítással.

Elvégezték az N-acetil- $\alpha$ -D-glükózamin és a  $\beta$ -D-glükuronsav teljes rezgési spektroszkópiai jellemzését FT-IR spektroszkópiai mérések alapján. Az eredményeket 2 fő (1 fő TKI) érte el, kb. 1.8 MFt kutatócsoporti (ebből kb. 500 eFt pályázati) ráfordítással.

*Anyagszerkezet kutatások:* Elsőként dolgoztak ki módszert a nanoméretű hexagonális volfrám-trioxid ( $\text{h-WO}_3$ ) összetételének szabályozására, mely vegyület nyílt csatornás szerkezete miatt intenzív nemzetközi kutatás tárgya. A korábbi évtizedek felfogásával szemben bizonyították, hogy a tiszta, sztöchiometrikus  $\text{h-WO}_3$  a valóságban nem létezik, csak

egy idealizált vegyület, valójában a  $h\text{-WO}_3$  egy kis idegen iontartalmú hexagonális volfrám-oxidbronz. A  $h\text{-WO}_3$ -ból  $\text{H}_2\text{S}$  gázszenzort készítettek, és kimutatták, hogy a  $h\text{-WO}_3$  összetétele döntően megszabja a gázérzékelési képességét. Az eredményeket 4 fő (1 fő TKI) érte el, kb. 1.5 MFt kutatócsoporti (ebből kb. 300 eFt pályázati) ráfordítással.

*Intelligens anyagok kutatása.* Hőmérsékletváltozással indukált kollapszust mutató gélek egy új típusát fejlesztették ki, amelyek mágneses nano-, vagy mikro-részecskéket tartalmaztak. A szubsztituált poliakrilamid láncokból (mint pl. poli-N-izopropil-akrilamid) álló gélek állapota egyszerre változtatható a hőmérséklettel és a mágneses térrel. Nano-, mikro- és mm nagyságrendjébe eső gélgömböket állítottak elő. Ezek segítségével tanulmányozták a gélkollapszust, valamint gyógyszer tesztmolekulák kioldódásának kinetikáját a szabályozott hatóanyag leadás modellezése céljából. Az eredményeket 2 fő (1 fő TKI) érte el, kb. 1.0 MFt kutatócsoporti ráfordítással.

*Vegyipari műveletek modellezése.* Általános, R-gráf alapú szuperstruktúrát és modellezési elveket felhasználva hagyományos desztilláló kolonnát modelleztek. Az így kidolgozott szigorú matematikai modell felhasználásával többkomponensű elegy elválasztására szolgáló extraktív desztillációs eljárást modelleztek, és az így előállított modell megoldásához szükség algoritmust az aktuális problémához igazították. Az R-gráf alapú modellezési alapok miatt a későbbiekben más vegyipari műveletek hasonló módon felépített modelljeihez könnyen kapcsolhatók a kialakított modellek. Az eredményeket 4 fő (1 fő TKI) érte el kb. 2.400 MFt kutatócsoporti (ebből kb. 300 eFt pályázati) ráfordítással.

*Biológiai rendszerek modellezése.* A sejtciklus alap fiziológia viselkedéseit figyelembe véve levezették a szabályozó hálózat dinamikai profilját, majd a sejtciklus központi regulátor Ciklin-dependens-kinázainak biokémiáját is figyelembe véve megjósolták a szabályozó hálózat molekuláinak a kölcsönhatásait. Megmutatták, hogy a hengeres alakú hasadó élesztő (*Schizosaccharomyces pombe*) sejtek növekedésének szabályozásában egy diffúziós-konvekciós reakció mechanizmus játszik szerepet. A modellel jóslni tudják, hogy milyen molekuláris reguláció állhat a szabályozás hátterében. Az eredményeket 3 fő (1 fő TKI) érte el kb. 2.2 MFt kutatócsoporti (ebből kb. 1.5 MFt pályázati) ráfordítással.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

#### *Fontosabb külföldi együttműködések*

- JRC, Institute for Transuranium Elements (Németország): aktinida kutatások
- University of Geneva (Svájc): aktinida kutatások
- University of Novi Sad (Szerbia): átmenetifém komplexek kutatása
- Matrix Biology Institute, Edgewater (USA): poliszacharidok szerkezeti kémiája
- Massey University, Auckland (Új-Zéland): fémhalogenid kutatások
- University of Basilicata, Potenza (Olaszország): lantanoida kutatások
- Washington State University, Pullman (USA): lantanoida kutatások
- Heinrich-Heine-Universität, Düsseldorf (Németország): polimergél kutatások
- Montanuniversität Leoben, (Ausztria): mágneses térre érzékeny kompozitok kutatása
- Romanian Academy of Sciences; University Politehnica Timisoara, Temesvár (Románia): strukturált mágneses nano- és mikrorészecskék kutatása.
- Russian Academy of Sciences; Moscow State University, Moszkva (Oroszország): új típusú polimer gélek kifejlesztése, molekulászerkezet kutatások
- Department of Materials Science and Engineering, SUNY, Stony Brook, NY (USA): Nanoméretű volfrám-oxidok előállítása, szerkezete és gázszenzorként való alkalmazása

- University of Oulu (Finnország): Nanoméretű volfrám-oxidok kutatása
- Fontosabb hazai együttműködéseink:
- KFKI Atomenergia Intézet, Budapest: fém-halogenid kutatások
- Debreceni Egyetem, Kolloidkémiai Tanszék: biopolimerek tulajdonságainak vizsgálata
- Szegedi Egyetem, Kolloidkémiai Tanszék: intelligens iszappelyhek kutatása
- Szerkezeti Kémia Intézet, MTA-KKI, Budapest: Nanoméretű volfrám-oxidok kutatása
- Kerámia és Nanokompozit Osztály, MTA-MFA, Budapest: Nanoméretű volfrám-oxidok kutatása
- Elektronikus Eszközök Tanszék, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Atomfizika Tanszék, BME, Budapest: Nanoméretű volfrám-oxidok kutatása

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

- FP7 211690: Aktinida oxidok és karbidok molekuláris és termodinamikai jellemzőinek meghatározása. E pályázat teszi lehetővé nagy számítási idő igényű aktinida kutatásainkat.
- OTKA K-68750: Multifunkcionális polimer gélek és kompozitok kifejlesztése. A pályázat lehetővé teszi a multifunkcionális polimergelek és kompozitok kifejlesztését, a pályázat keretén belül egy fiatal posztdoktor foglalkoztatását.
- OTKA K-60365: Magas hőmérsékletű szervesetlen molekulák szerkezetvizsgálata, melyből sikeres fémhalogenid kutatásaikat valósítják meg.
- OTKA T-46183: Biológiai aktivitással rendelkező molekulák szerkezetvizsgálata, e pályázatból finanszírozzák szerves rendszerekben fellépő kölcsönhatások vizsgálatát.
- OTKA F-60414: Biológiai hálózatok reakciókinetikai vizsgálata, mely biológiai rendszerek modellezésében elért eredményeiket tette lehetővé.

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

1. Hargittai I, Hargittai M: Molecular structure of hyaluronan: an introduction, Structural Chemistry 19(5): 697-717 (2008)
2. Vest B, Varga Z, Hargittai M, Hermann A, Schwerdtfeger P: The elusive structure of CrCl<sub>2</sub> – A combined computational and gas-phase electron diffraction study, Chemistry-A European Journal 14: 5130-5143 (2008)
3. Szilágyi IM, Madarász J, Pokol G, Király P, Tárkányi G, Saukko S, et al.(4): Stability and controlled composition of hexagonal WO<sub>3</sub>, Chemistry of Materials 20: 4116- (2008)
4. Kovács A, Nyerges B, Izvekov V: Vibrational analysis of N-acetyl- $\alpha$ -D-glucosamine and  $\beta$ -D-glucuronic acid., Journal of Physical Chemistry B 112: 5728-5735 (2008)
5. Farkas T, Czuczai B, Rev E, Lelkes Z: New MINLP model and modified outer approximation algorithm for distillation column synthesis, Industrial and Engineering Chemistry Research 47: 3088-3103 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	7,4	Ebből kutató <sup>2</sup> :	5,6
PhD, kandidátus: 4	MTA doktora: 2	levelező tag: 1	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			52
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			30
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0		idegen nyelven:	18
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 1		idegen nyelven:	2
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 39,562		összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	172
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			158
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 1	könyvfejezet: 2	jegyzet: 0	
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 1	könyvfejezet: 5	jegyzet: 0	
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 9	poszterek száma <sup>10</sup> :		5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 1	Diplomamunkát: 3	PhD-t: 1	
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			828
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			39,8 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		7,2 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			5
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		4,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			2
EU-forrásból: 2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		2,5 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## **BME FÉMTECHNOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT**

Ginsztler János, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Goldmann tér 3.  
Telefon: 463-2954, Fax: 463-3250  
e-mail: matsci@eik.bme.hu

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

- Az endovaszkuláris terápiában alkalmazott implantátumok anyagainak és bevonatainak kutatása.
- A növelt hőmérsékleten üzemelő szerkezeti anyagok szemcsehatárain lezajló folyamatok kutatása.
- A fémmátrixú kompozithuzalok és szintaktikus fémhabok fejlesztése.
- A faipari fűrészlapok gyártásában alkalmazható lézersugaras technológiák kutatása.

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

- Az értágítóbetétek hazai gyártójával közösen továbbfejlesztették a Sanocor sztentcsaládot, amely tágulási egyenletességében kimagasló tulajdonságokat képvisel. Az eredményt 10 fős kutatócsoport érte el, akik közül 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 1,8 MFt. Együttműködő partnerek: Minvasive Kft., CVI Kht.
- Az ausztenites acélok szemcsehatár-tulajdonságainak tanulmányozásával igazolták, hogy termomechanikus kezelésekkel a szemcsehatárok korróziós ellenállása jelentősen fokozható. Az eredményt 3 fős kutatócsoport érte el, akik közül 1 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 0,5 MFt. Együttműködő partnerek: ELTE Általános Fizika Tanszék.
- Befejezték a kompozithuzallal erősített dupla kompozitok kutatását. Meghatározták az alumínium mátrixú szintaktikus fémhabok mechanikai és mikroszerkezeti jellemzőit, és új eljárást dolgoztak ki a nyomásos infiltrálás tényezőinek mérésére. Az eredményt 5 fős kutatócsoport érte el, akik közül 1 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 2,5 MFt. Együttműködő partnerek: MTA KK.
- Ipari és kutatási partnerekkel közösen befejezték a növelt élettartamú, faipari szalagfűrészlapok gyártását biztosító lézertechnológiai fejlesztéseket. Az eredményt 12 fős kutatócsoport érte el, akik közül 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 2,9 MFt. A fejlesztés eredményeként a versenyképesség érdemi javulása és gazdasági hasznon várható az A-LAP Kft.-nél, amely a fejlesztésre 20 MFt-ot (Kozma László pályázati támogatást és saját forrást) fordított.

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

A hazai kutatási partnerek körében intenzív együttműködésben álltak a következő kutatóhelyekkel: a BME számos tanszéke, MTA KK Röntgendiffrakciós Csoport, MTA SZFKI Lézeralkalmazási Osztály, Bay-ATI, Bay-LOGI, Bay-Nano.

Szoros együttműködés alakult ki a kutatási feladatok végrehajtásában a következő ipari partnerekkel: Minvasive Kft., CVI Kht., Lasersystems Kft.

A nemzetközi együttműködések terén megerősítették a kapcsolatot a temesvári ISIM hegesztési kutatóintézettel. Magyar–francia TÉT pályázat keretében felerősítették a kapcsolatot az INSA de Lyon MATEIS kutatóintézettel.

A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet vállaltak a BME ATT oktatási tevékenységében: ennek keretei között több tantárgy előadásait gondozták a nappali és a doktori képzésben, valamint a hegesztőszakmérnök-képzésben.

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

2008. év végi döntéssel Magyar–francia TÉT pályázatot nyert el a kutatócsoport vezetője, amely közös kutatás témája: Ni-szegény duplex korrózióálló acélok kutatása.

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

1. Gaál Z, Szabó PJ, Ginsztler J: Evolution of special grain boundaries in austenitic steels. Materials Science Forum, 589: 19-24 (2008)
2. Izápy V; Puskás Zs; Ginsztler J; Dévényi L; Dobránszky J: A hőkezelés szerepe a koszorúérsztentek gyártásában. In: Tóth T (szerk.): Előadások; XXIII. Hőkezelő és Anyagtudomány a Gépgyártásban Országos Konferencia és Szakkiállítás; Balatonfüred; 2008. október 1-3. 53-58.
3. Dobranszky J, Bernath A, Marton H: Characterisation of the plasma shape of the TIG welding arc. International Journal of Microstructure and Materials Properties, 3 (2008:1), 126-140.
4. Dobranszky J: Microstructural Characterization of Eutectoid Steel Strips. Materials Science Forum, 589 (2008) 13-18.
5. Kientzl I, Dobránszky J: Production and Behaviour of Aluminium Matrix Double Composite Structures, Materials Science Forum, 589 (2008) 105-110.
6. Orbulov I, Németh Á, Dobránszky J: Composite production by pressure infiltration. Materials Science Forum, 589 (2008) 137-142.
7. Bognár E, Ring Gy, Balázs T, Dobránszky J: Drug Coatings and Coating Technologies of Coronary Stents. Materials Science Forum, 589 (2008) 361-366.
8. Gellér ZsE, Albrecht K, Dobránszky J: Electropolishing of Coronary Stents. Materials Science Forum, 589 (2008) 367-372.
9. Meszlényi Gy, Dobránszky J, Puskás Zs: Laser cutting of high precision tubes. Materials Science Forum, 589 (2008) 427-431.
10. Meszlényi Gy, Nagy P, Bella Sz, Dobranszky J: Taiarea si sudarea cu fascicul laser a stenturilor coronariene. bid ISIM, 17 (2008:2) 17-26.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Fémtechnológiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	5,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3,5
PhD, kandidátus: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			30
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			30
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0		idegen nyelven:	0
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 8		idegen nyelven:	22
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 0		összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	8
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			8
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 14	poszterek száma <sup>10</sup> :		3
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		4
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 8	Diplomamunkát: 8	PhD-t:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			812
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :		24,9 MFt	
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	9,3 MFt	
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :		0 MFt	
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,3 MFt	
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt	
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt	
NFT-témák száma <sup>18</sup> :0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt	
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup>			0
EU-forrásból: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt	
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt	
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt	
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## BME FIZIKAI GEODÉZIA ÉS GEODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT

Ádám József, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.  
Telefon: 463-3222, Fax: 463-3192  
e-mail: jadam@sci.fgt.bme.hu

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

A *nehézségi erőter gradienseinek* meghatározásával kapcsolatos eredmények: *magassági változásokkal* kapcsolatos vizsgálatainkat kétféle tömegmodellen végeztük, a 2002. évi dunai árvíz tömegmodelljén, és a Gellért-hegyi víztározó modelljén. Tapasztalataink szerint (1) a gradiensek legnagyobb változása az oldalirányú sűrűség-inhomogenitások (a vizsgált tömegmodellek szélé) felett a felszínen és a felszín közvetlen közelében tapasztalható, (2) ami a magasság növekedésével igen gyorsan csökken. Egyidejűleg végeztünk Eötvös-ingás és graviméteres méréseket, amelyek alapján a nehézségi erőter jellemzőinek alternatív mérésen alapuló meghatározási lehetőségét vizsgáltuk. *Tapasztalatok:* (1) A *nehézségi erőter horizontális gradienseinek* meghatározására egyértelműen az Eötvös-inga bizonyult alkalmasabbnak. (2) A *nehézségi gyorsulás különbségeket* ingamérésekkel közvetve (pl. DTM felhasználásával) meghatározva a graviméteres mérésekkel azonos irányú, de eltérő nagyságú vektorokat kaptunk. (3) A hálózatban végzett ingamérésekből számított *vertikális gradiensek* értékei egyelőre következetesen alulbecsülték a valódi értékeket, de az eredmények biztatóak. *Eötvös-inga* mérési kampányainkkal kapcsolatos *technikai újításaink:* a 4-6 E pontossággal végzett mérések pontossága az általunk egyes hibahatások (pl. észlelő tömege) kiküszöbölésére kifejlesztett digitális kamerás észleléssel várhatóan javítható.

*Geodéziai matematikával* kapcsolatos eredmények: több, a geodéziában előforduló optimumszámítási problémára alkalmaztuk a *differenciális evolúciós algoritmust* (pl. hálózatkiegyenlítés, különböző függvényillesztések, spektrumillesztések).

A *GNSS* témakörben megvizsgáltuk, hogy milyen megbízhatósággal lehet becsülni a troposféra integrált vízgőztartalmát GNSS mérésekből. A becsült vízgőztartalom értékeket rádiószondás mérésekkel, valamint egy jelentős nyári zivatarfront evolúciójával is összevetettük. Eredményeink azt mutatták, hogy az integrált vízgőztartalom mintegy 2 mm-es középhibával határozható meg GPS adatok alapján.

A *műholdradar interferometria* területe: (1) A kialakított információs rendszert folyamatosan fejlesztjük, üzemeltetjük. (2) Rendszert fejlesztünk az InSAR mozgásadatok földügyi szolgáltatásba való integrálásához. (3) Megtörtént az első hazai többtechnikás mozgásvizsgálat és PS-InSAR validáció. (4) Megtörtént az első hazai PS-InSAR adatfeldolgozás. (5) Megterveztünk és megépítettünk két mesterséges műholdradar reflektort.

*GPS geodinamika* terén: (1) Felszínmozgás monitorozást végzünk teljes országos lefedettséggel és vezető szerepünk van a 14 országot átfogó közép-európai GPS geodinamikai programban. (2) Jelentős lépéseket tettünk a nagymennyiségű GPS adatok automatizált kiértékelése terén. (3) Fejlesztünk egy, GPS geodinamikai hálózat mérési eredményeit felhasználó, deformáció analízist végrehajtó programot.

A *pályaszámításokkal* kapcsolatosan a földtudományok integrálására vonatkozó elképzeléseinknek egy látványos eredménye az eddig nagy excentricitású műholdpálya számítására használt eljárás sikeres alkalmazása egy geodéziai célú, GPS műhold körpályájának a meghatározására. További vizsgálataink a Lagrange-pontok környezetében ismert ún. librációs mozgás stabilitására vonatkoztak, amelyek keretében meghatároztuk a



pont környezetében töltött időt a Nap és a bolygó tömegének, illetve a pályák excentricitásának függvényében.

*A nagyon hosszú bázisvonalú interferometria (VLBI) technika alkalmazásainak eredményei:* (1) *Halvány extragalaktikus rádióforrások felmérése* (DEVOS program), a DEVOS kiválasztási módszerek alkalmazási területének növelése. Száz kvazárból álló minta összeállítása, amely a jövőben VLBI technikával is megfigyelhető lesz. Erre vonatkozóan 2008-ban már sikeres új EVN (Európai VLBI Hálózat) megfigyelési programjavaslatokat nyújtottunk be. (2) *A világegyetemben a legtávolabbi ismert rádiósugárzó kvazár (J1427+3312) rádiószerkezetének feltérképezése*, besorolása az ún. kompakt szimmetrikus objektumok viszonylag ritka típusába. (3) Részt vettünk a *második generációs űr-VLBI programok előkészítésében*. (4) A *J1128+592 jelű kvazárral* kapcsolatban befejeztük VLBI megfigyelés-sorozatunkat. Eredményünk szerint a forrás egy kompakt magból és egy jet komponensből áll, továbbá meghatároztuk a kvazár rövid időskálájú fényességváltozását okozó csillagközi ionizált felhő lehetséges távolságát és sebességét. (5) *A nemzetközi égi vonatkoztatási rendszert (ICRF) kijelölő kvazárok szerkezetének és pozíciós változásainak összefüggésére* vonatkozó vizsgálatok egy eddig még sosem vizsgált nagyságú (75 elemű) minta alapján. Előzetes eredményeink szerint az összefüggés, szemben az általános vélekedéssel, statisztikai értelemben nem egyértelmű.

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

A gravitációs gradiensek szárazföldi meghatározása ismét előtérbe került a korszerű gravimetriai műholdak (CHAMP, GRACE, GOCE) mérései számára elengedhetetlen kiegészítő információ szolgáltatása céljából. A gravitáció ismerete alapvető eszköze a nyersanyagkutatásnak, időbeli változásából pedig a globális felmelegedés jeleire lehet következtetni (Kutatói team: 5 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 4 fő).

A troposféra integrált vízgőztartalmának meghatározása egyre fontosabb meteorológiai alkalmazása a GNSS helymeghatározó rendszereknek. Az ilyen irányú vizsgálatok eredményei alapján elmondhatjuk, hogy egy gyors frontátvonulást is jól nyomon lehet követni, ami fontos eszköze lehet a meteorológiai előrejelzéseknek. (5 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 1 fő).

Mivel a PS-InSAR technológia alkalmas az emberi tevékenység okozta felszínmozgás észlelésére a sűrűn lakott területeken is, ezért eredményeit a gazdaság és a társadalom számos területen hasznosíthatja. Fontosnak tartjuk a budapesti ún. ASMI-adataink felhasználásával készített, bárki által elérhető internetes felületünket, amely segítségével az egyes szórópontok elmozdulás adatai közérthetően, grafikusán megjeleníthetők. (2 fő, ebből a k.cs. tagja: 2 fő).

A legpontosabb kvázi-inerciális vonatkoztatási rendszert (ICRF) a távoli rádiósugárzó kvazárok VLBI megfigyelései alapján definiálták és tartják fenn. Aktuális geodéziai feladat az ICRF pontosság-növelési célú újradefiniálása, továbbá új referenciapontokkal való sűrítése, mely feladatokhoz munkánkkal nagymértékben hozzájárultunk. (2 fő, ebből a k.cs.tagja: 2 fő).

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

International Association of Geodesy (IAG), Communication and Outreach Branch (COB) működtetése 2003-tól. BME Általános és Felsőgeodézia Tanszékének oktatói munkáiban jelentős részvétel. ELTE Csillagászati Tanszék és Fizika Doktori Iskola: óraadás;

diplomamunka témavezetés; szigorlati bizottsági és bírálóbizottsági tagság; Joint Institute for VLBI in Europe (JIVE), Dwingeloo, Hollandia, VLBI Space Observatory Programme-2 (VSOP-2) Európai Munkacsoport tagság. Japan Aerospace Exploration Agency (JAXA), Institute of Space and Astronautical Science (ISAS), Sagamihara, Japán, ahol az MTA-JSPS pályázat keretében meghirdetett Japan Society for Promotion of Science (JSPS) ösztöndíjjal 12 hónapot tartózkodott. CEGRN Consortium titkárság; Consortium Governing Board tagság; GMES TerraFirma Magyarország képviselő. Chair of GGOS Working Group on User Linkage and Outreach.

Továbbá nem hivatalos keretek között érdemi együttműködésben vagyunk a bonni Max Planck Rádiócsillagászati Intézettel, a Müncheneri Műszaki Egyetem Csillagászati és Fizikai Geodéziai Intézetével (IAPG, TUM), a Kyotoi Egyetem Felsőgeodéziai Laborjával (KUGI) és Katasztrófa Megelőzési Kutatóintézetével (DPRI), a Grazi Műszaki Egyetem és a Kalsruhei Egyetem geodéziai intézeteivel, az ELTE Csillagászat Tanszékével, valamint az Eötvös Loránd Geofizikai Intézettel.

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

*Nemzetközi:*

ESRIN/Contract no. 19366/05/I-EC, EU-ESA GMES TerraFirma H2 fázis

*Hazai:*

KvVM-MŰI: K-36-07-00023K: Budapest műholdas mozgástérképe.

KvVM-MŰI: K-36-08-00036K: Budapest műholdas mozgástérképe.

OTKA K72515: Kompakt extragalaktikus objektumok vizsgálata rádió-interferométeres technikával.

OTKA: K-76231: Eötvös-inga mérések geodéziai alkalmazása.

OTKA: K-72806: Faye-anomáliák meghatározásának pontossági vizsgálata

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

1. Csapó G, Tóth Gy, Laky S, Völgyesi L (2008): Experiences of new Eötvös torsion balance observations and reliability tests. *Geophysical Research Abstracts*, Vol. 10, 2-2-2008
2. Frey S., Gurvits L.I., Paragi Z., Gabányi K.É. (2008): High-resolution double morphology of the most distant known radio quasar at  $z=6.12$ . *Astronomy and Astrophysics*, Vol. 484, pp. L39-L42
3. Fuhrmann L., Krichbaum T. P., Witzel A., et al (köztük Gabányi K. É.): Testing the inverse-Compton catastrophe scenario in the intra-day variable blazar S5 0716+71 - III. Rapid and correlated flux density variability from radio to sub-mm bands. *Astronomy and Astrophysics*, Vol. 490, pp. 1019-1038
4. Gabányi K.É., Marchili N., Krichbaum T.P., et al: Annual modulation in the IDV timescale of J1128+592 Newly Discovered Highly Variable IDV Source. *Bursts, Pulses and Flickering: wide-field monitoring of the dynamic radio sky*, PoS (Dynamic2007) 021
5. Zaletnyik P, Völgyesi L, Kirchner I, Paláncz B (2008): Combination of GPS/leveling and the gravimetric geoid by using the thin plate spline interpolation technique via finite element method. *Journal of Applied Geodesy*, 1, pp. 233–239, DOI 10.1515/JAG.2008.025

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport

Átlagléltszám <sup>1</sup> :	12	Ebből kutató <sup>2</sup> :	12
PhD, kandidátus: 7	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag: 1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			31
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			23
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul: 0	idegen nyelven:		7
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 6	idegen nyelven:		10
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 27,891	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		22
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			12
Magyarul könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Idegen nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0			ebből külföldön: 0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 7			poszterek száma <sup>10</sup> : 7
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 5	Diplomamunkát: 4	PhD-t:	1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			2200
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			24,6 MFt
Fiatalkutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		12,7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			7,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			2
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		2,2 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup>			1
EU-forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		1,5 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## BME GÉPEK ÉS JÁRMŰVEK DINAMIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Stépán Gábor, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 5.  
Telefon: 463-1369, Fax: 463-3471  
e-mail: stepan@mm.bme.hu, www.mm.bme.hu/~gjd

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

*Gépek és járművek stabilitási- és rezgésvizsgálata* kapcsán klasszikus sajátfrekvencia számítási algoritmusok továbbfejlesztése, a forgácsolás közben fellépő rezgések hatásainak vizsgálata, és a - rezgések kialakulásában kulcsszerepet játszó - kerék-talaj kapcsolat kísérleti modális analízise volt a három legfontosabb feladat. Ez utóbbi téma vizsgálata során egy olyan gumikerék modell is kifejlesztésre került, mely különösen pontosan írja le a kis sebességű manőverezés (pl. parkolás) során bekövetkező kerék deformációkat. Az eredmények az elektronikus menetstabilizáló rendszerek (ABS, ESP) továbbfejlesztése során hasznosulhatnak.

A elektronikus menetstabilizáló rendszerek és a modern fékberendezések *számítógépes szabályozással* működnek. A digitális hatásokhoz köthető nemlinearitások következtében kialakuló kaotikus rezgéseknek, valamint a digitális erőszabályozású robotok viselkedésének vizsgálata folytatódott a beszámolási évben. Az újonnan elért kísérleti eredmények igazolták az ún. „act-and-wait” típusú szabályozás hatékonyságát. Új kutatási terület a folytonos és diszkrét idejű szabályozó rendszerek együttműködése során adódó jelenségek modellezése.

*Járműalkatrészek tönkremenetelének* vizsgálata kapcsán az ún. Portevin-Le Chatelier hatás tanulmányozása folytatódott, termodinamikai megfontolások figyelembe vételével, továbbá az ún. képlékeny keményedés leírása kapcsán születtek új eredmények. A gyakorlatorientált kutatások az acélszerkezetek tönkremeneteli mechanizmusának vizsgálatára koncentráltak.

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

A közúti balesetek nagy része visszavezethető a járművek stabilitási problémáira, ezért a korszerű gépkocsikban biztonsági elektronikai rendszereket (ABS, ESP) használnak. Az ilyen rendszerek hatékony működése nagyban függ az alkalmazott kerékmodellről. 2008-ban folytatódott a kutatócsoport által korábban kifejlesztett gumikerék modell pontosítása. A kifejlesztett modell pontosabban írja le a kis sebességű manőverezés (pl. parkolás) során fellépő kerék deformációkat, így jobban tervezhető a jármű mozgásának pályája. Az új kerékmodell fejlesztése egy ismert járműdinamikai probléma, a kerékszítálás (simmi) alapján történik. Ezt a rezgő mozgást például bevásárlókocsik kerekeinél figyelhetjük meg, de ugyanúgy jelentkezik motorkerékpároknál és repülőgép orrfutóknál is. A korábban átépített kísérleti berendezés segítségével elkészült a kerékszítálás leírásához használt mechanikai modell kísérleti modális analízise a kerék gördülése közben. Az eredmények igazolják az elméleti úton meghatározott rezgési frekvenciák jelenlétét és változását a vontatási sebesség függvényében. Az eredmények jelentősége abban áll, hogy segítségükkel az ABS és ESP rendszerek új generációja jöhet létre.

A 2007-től induló kutatási terv célul tűzte ki rúdszerkezetek sajátfrekvenciáinak közelítő számítására szolgáló algoritmus kidolgozását. A 2008-ban végzett kutatások eredményeképpen valamelyest csökkent a probléma kezelésének időigényessége, és előrelépés történt az említett eljárás és a Bosznay – féle módszer összekapcsolása terén.

A forgácsolási folyamat korábban felállított kontinuummechanikai modelljét kibővítve a munkadarab rezgéseit leíró differenciálegyenletekkel, vizsgálhatóvá váltak a munkadarab rezgéseinek a forgácsolás jellemzőire gyakorolt hatásai. Az eredmények összhangban vannak a korábbi kísérleti tapasztalatokkal. A felállított modell lehetővé teszi a technológiai folyamat lehetséges variációinak gyors áttekintését.

*A gépek és járművek stabilitási- és rezgésvizsgálatával* kapcsolatos eredményeket három fő csoport érte el, mindhárman a kutatócsoport tagjai. A ráfordítás becsült összege: kb. 9 MFt, 300 eFt pályázatból.

A beszámolási évben folytatódtak a digitálisan szabályozott rendszerek egyszerű modelljének tekinthető, többdimenziós mikro-káosz leképezések kaotikusságának bizonyítását célzó vizsgálatok: egy PD szabályozás esetében a digitális hatásokat figyelembe véve kétdimenziós, szakaszosan lineáris leképezés adódott. Ebben az esetben sikerült bizonyítani kaotikus megoldások létezését, és egy korábban már vizsgált, ún. differenciális szabályozásra vonatkozó káosz-bizonyítás részletes kidolgozása is megtörtént. Szabályozott nemlineáris dinamikai rendszerekben a folytonos és diszkrét idejű részek együttműködése során implicit anticipatív hatások merülhetnek fel, melyek vizsgálata a beszámolási évben kezdődött meg. Ezek a vizsgálatok elméleti alapot szolgáltatnak a korszerű szabályozási rendszerek továbbfejlesztéséhez.

2008-ban folytatódtak a 2007-ben megkezdett, a robotok digitális erőszabályozásának stabilitásával kapcsolatos kísérletek. Az eredmények a világon elsőként igazolták az alkalmazott „act-and-wait” (beavatkozok és várok) típusú szabályozás hatékonyságát. Az „act-and-wait” szabályozás lehetővé teszi az arányos szabályozási tényező jelentős növelését, mely a szabályozási hiba csökkenését vonja maga után.

*A számítógépes szabályozással* kapcsolatos eredményeket öt fő érte el, ebből három tagja a kutatócsoportnak. A ráfordítás kb. 12,4 MFt, pályázatból 1 MFt.

A Portevin-Le Chatelier hatást a szakirodalom két eltérő módon tárgyalja. A makroszkopikus tárgyalásmód nagyon hasonlít a kutatócsoportban alkalmazott, a dinamikai rendszerek elméletére alapozott vizsgálathoz. Emellett ismert egy diszlokációk mozgására épített magyarázat is. A 2008 évi kutatómunka során az eddigi eredmények pontosítása történt meg, termodinamikai megfontolások figyelembe vételével. A kutatás során elkezdődött a második főtétel és a negatív rate-dependence jelenség kapcsolatának vizsgálata.

Az anyagmodellezés terén a 2008. évben elért eredmények a képlékeny keményedés és a Ljapunov stabilitás összefüggésére vonatkoztak: megmutatják, hogy miként kell a konstitutív egyenletet egy stabil és a Drucker posztulátumot teljesítő anyag esetén felírni.

A csavarkihúzódasos kísérletek során a csavaros illetve szegecselt kapcsolatok legalapvetőbb elemeinek vizsgálata történt meg teherbírási állapotban. Az alkalmazott numerikus módszer más acél szerkezetekre is alkalmazható, amelyeknél a szakadási mechanizmust nagyon pontosan meg lehetett határozni. Ezen technika segítségével különböző acélszerkezetek törését és tönkremenetelét lehet megjósolni.

A járműalkatrészek tönkremenetelével kapcsolatos eredményeket két fő érte el, mindketten a kutatócsoport tagjai. A ráfordítás kb. 7,5 MFt, ebből pályázati forrás 800 eFt.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

*Felsőoktatási kapcsolatok:* BME, Pécsi Tudományegyetem; Arisztotelész Egyetem, Thessaloniki; McGill University, Canada; University of Bristol, UK; Michigan State University, USA

*Folyóirat szerkesztőbizottsági tagságok:* Periodica Polytechnica, Meccanica, J. Vibration and Control, J. of Nonlinear Science, J. of Computational and Applied Mechanics, Phil. Transactions of the Royal Society, Computers and Structures, Int. J. of Aerospace Engineering, Physica D, Mechanism and Machine Theory, Pollack Periodica

*Konferencia bizottsági tagságok:* CASYS08

*Tisztségek nemzetközi szervezetekben:* Secretary, IFToMM Technical Comm. of Nonlinear Oscillations; CISM Scientific Council; European Solid Mechanics Conference Committee, IUTAM Symposium Committee

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

Két folyamatban lévő és egy 2008-ban befejezett OTKA-pályázat mellett folytatódott az EU FP6-os program keretében az ACROBOTER projekt. A nemzetközi részvétellel folytatott kutatás célja egy új típusú szervizrobot kifejlesztése. A projekttel kapcsolatos munka a tervezett ütemben halad.

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

1. S. Roy, Szekeres A., Y. Wang, A. Nair: On solvent diffusion in a solid with large dilatation, Composites Science and Technology, 68 (13): 2697-2704 (2008), IF: 2.171
2. Takács D., Orosz G., and Stépán G.: Delay effects in shimmy dynamics of wheels with stretched string-like tyres, European Journal of Mechanics A/Solids, appeared online, (2008), doi:10.1016/j.euromechsol.2008.11.007, IF = 1.049
3. Kovács LL., Kövecses J, Stépán G.: Analysis of effects of differential gain on dynamic stability of digital force control, International Journal Of Non-Linear Mechanics 43: 514-520 (2008), IF = 1.249
4. Takács, D., Stépán, G.: Experiments on quasi-periodic wheel shimmy, Journal of Computational and Nonlinear Dynamics, accepted.
5. Csernák G., Pálmai Z.: Exploration of the chaotic phenomena induced by fast plastic deformation of metals, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 40: 270-276 (2009), IF: 0.378
6. Iványi P. és Iványi M.: On the simulation of failure mechanisms in steel structures, Advances in Engineering Software, 2008. (publikálásra elfogadva) IF: 0.529
7. Béda P.B., Béda Gy.: Conditional Lagrange derivative and its application, PAMM, 7 (1): 2090007-2090008 (2007) (elektronikus folyóirat, hozzáférhető 2008-tól)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	5,25	Ebből kutató <sup>2</sup> :	5,25
PhD, kandidátus: 4	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag: 1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			28
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			25
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0	idegen nyelven:		4
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		16
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 4,847	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		27
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			26
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 1	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 2	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0			<i>ebből</i> külföldön: 0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 13			posztterek száma <sup>10</sup> : 1
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		8
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 2	Diplomamunkát: 6	PhD-t: 0	
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			1540
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			26,8 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		2,1 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			1,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0,3 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		12 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## BME IRÁNYÍTÁSTECHNIKAI KUTATÓCSOPORT

Keviczky László, az MTA rendes tagja  
1111 Budapest, Goldmann György tér 3.  
Telefon: 463-2870; Fax: 463-2871  
e-mail: keviczky@sztaki.hu

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

Elméleti és gyakorlati módszerek kidolgozása folyamatok optimális irányítására. Az elméletileg elérhető legjobb (határ-optimalis) szabályozók kutatása. Komplex rendszerek modellezési és irányítási módszereinek kutatása. Predikciós irányítási algoritmusok hatékonyságának növelése. Intelligens alakfelismerő, adatbányászó rendszer fejlesztése. A nemlineáris hatások vizsgálata a bifunkciós folyamatokra az állapotváltozóktól függő módon felépítésüket változtató rendszerekben.

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

- A saját eredményeken alapuló hiba szeparációs elv szerinti optimalizálás elméletének felhasználásával befejezték a stabilis folyamatok lineáris szabályozóinak optimalizálási módszertanának kidolgozását a legáltalánosabban használt L2, Linf és H2, Hinf normákra (kritériumokra). A projekt eredeti célkitűzései között szerepelt (kisebb jelentőségű) L1 normára nem sikerült az eredményeket adaptálni.
- A klasszikus LQ probléma frekvenciatartománybeli megoldásának analízisével megmutatták, hogy az irodalomban széles körben elterjedt diadikus súlymátrix választásakor lehetnek olyan tervezési cél tartományok, amelyek nem érhetők el a feladat bármilyen módszer szerinti megoldásával.
- Kiemelkedő kutatási eredményt a hulladék és megújuló energiák hasznosítására kifejlesztett módszerekkel, a társadalmilag hasznos megvalósítás szempontjából pedig az ultra-nagy fordulatszámokhoz kapcsolódó nemlineáris rendszer optimalizálása során érték el [45], [46].
- Új eljárást dolgoztak ki alulaktuált robotok irányítására LQR, altér stabilizációs és kombinált hibametrián alapuló módszerekkel, és elvégezték eme módszerek összehasonlítását. Az elmélet helyességét kísérleti rendszeren is demonstrálták.
- Új módszereket dolgoztak ki kamera kalibrációt nem igénylő sztereo képfeldolgozás területén az alacsony szintű képfeldolgozás során keletkező képillesztési probléma megoldására, a 3D projektív struktúra kinyerésére, az objektum felismerésre projektív invariánsok és előre definiált 3D adatbázis alkalmazásával, valamint a relatív metrikus transzformáció meghatározására a felismert objektumok között. Az eredmények a robotok mozgástervezésében hasznosíthatók.
- A nemlineáris folyamatrendszerek modellezése és irányítása területén elért elméleti eredmények alkalmazásával kidolgozták a Paksi Atomerőmű primerkörének egyszerűsített dinamikus modelljét, amely a minimálisan szükséges dinamikus elemeket tartalmazza mérlegegyenletekből származó állapotegyenletek formájában. A kutatási eredmények tudományos szempontból hozzájárulnak a Paksi Atomerőmű tervezett irányítástechnikai rekonstrukciójához.
- Létrehoztak egy ágens alapú diagnosztikai keretrendszert. A keretrendszert kibővítették olyan módszerekkel, amely operátori eljárások követésére képes, és a végrehajtás során észlelt anomáliák alapján végez diagnosztikát. A kidolgozott eszközöket és módszereket



folyamatos és félfolyamatos vegyipari technológiákra tervezik alkalmazni egy nemzetközi, ausztrál-magyar kutatási együttműködés keretében.

- Tovább folytatódta a véges kvantum-rendszerek állapotbecslésével kapcsolatos kutatások is. Véges mintaelemszám feltételezésével új, optimális módszereket dolgoztak ki 2-szintű kvantumrendszerek, ún. kvantum bitek állapotának becslésére, amelyeknek elvégezték részletes, matematikai statisztikai elemzését és összehasonlították ezeket más, az irodalomból ismeretes módszerekkel. A fenti, erősen alapkutatás jellegű vizsgálatok a majdani kvantum-számítógépekben történő adatkiolvasás és adattárolás céljaira lesznek felhasználhatók.
- Széleskörű nemzetközi kooperációban foglalkoztak a prediktorokon alapuló (predictive control) szabályozási módszerek vizsgálatával és algoritmusainak kutatásával. Kutatást végeztek robusztus predikciós irányítási algoritmusok lineáris és nemlineáris rendszerek irányítása területén. Lineáris rendszerekre vizsgálták a predikciós PID algoritmusok robusztusságát növelő módszereket. A predikciós PID algoritmusok robusztusságának növelésére alkalmazták a zajmodell szűrőpolinomját, valamint az eredeti struktúra kiegészítését egy Smith prediktorhoz hasonló struktúrával megfelelő szűrő beiktatásával. Nemlineáris rendszerek irányítására a parametrikus kvadratikus Volterra modellen alapuló szuboptimális algoritmust dolgoztunk ki.
- A mai információs társadalomban rendkívül sok adatot tartalmazó adatbázisok keletkeznek. Ezen adatbázisokban az információ megtalálása (adatbányászás) számításgényes feladat. A dokumentumok keresését nagyon megkönnyíti, ha a dokumentumokat sikerül osztályokba sorolni. A kutatás keretében tanítóval történő és tanító nélküli osztályozási módszereket vizsgáltak.
- A rendszeridentifikáció leggyakrabban használt megközelítései olyan matematikai modellekre építenek, amelyekben a függő változó, a rendszer kimenete zajos, ugyanakkor a rendszer bemenetét zajmentesnek tételezik fel. Számos alkalmazásban (pl. bizonyos szabályozási feladatoknál, kép- és hangfeldolgozásnál, idősorok analízisének,…) nemcsak a kimenőjel, hanem a bemenőjel is zajos. A modellezés nem explicit, hanem általánosabb implicit modellstruktúrát tételez fel. Erre, a gyakorlatban igen nagy jelentőségű esetre dolgoztak ki hatékony modell paraméter becslési technikát, amely élénk nemzetközi érdeklődést keltett.
- A pályázatban leírt célokhoz illeszkedően a változó struktúrájú nemlineáris rendszerekben a tervezés, szintézis területén születtek további új elméleti eredmények.

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

- A kutatócsoport által képviselt tudományos iskola egyik legnagyobb nemzetközi elismerése, hogy 2009-ben az ECC (European Control Conference) Budapesten kerül megrendezésre. A rendezvény általános elnöke és a Nemzetközi Program Bizottság elnöke is tagja a kutatócsoportnak. A csoportból többen részt vesznek az előkészítési munkákban. 2009-től a kutatócsoport vezetője lesz az EUCA (European Union Control Association) elnöke a következő két évre.
- Az IFAC Nemzetközi Automatizálási Szövetség CC2 Control Design Methods Koordináló Bizottságának volt elnöke csoportunk tagja. A Seouli Kongresszuson a szabályozáselméletben mutatkozó irányzatokról ún. Milestone (mérőköv) szekciót szervezett [24]. 12 éves IFAC tevékenységének elismeréseként (1996-2002-ig a Technical Committee on Optimal Control, 2002-2008-ig a CC2 elnöke) Outstanding Service Award kitüntetést kapott.

- Kölcsönös szemináriumok és kutatócserék szervezésén keresztül intenzív kapcsolatok folynak a Sevillai Műszaki Egyetem Automatizálási Tanszékével (Escuela Superior de Ingenieros, Departamento de Ingenieria de Sistemas y Automatica), a Kölni Műszaki Főiskola Folyamatszabályozási Tanszékével (közös PhD hallgatók és szeminárium), a Pozsonyi Műszaki Egyetem Automatizálási Tanszékével (kutatócsere és közös cikkek).
- Az amerikai IEEE-ban a Board of Directors egyik kutató akadémikusunkat a William E. Newell Award-dal tüntette ki. Nevezett az European Power Electronics and Motion Control Council elnöke, az European Power Electronic Association Executive Council tagja.

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

- NKTH 04/2004 RET Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont. (1876,0 mFt, tárgyévben befejeződött.) A kutatócsoportból 5 fő vett részt.
- NKFP 3A/086/2004 Környezetbarát villamosenergia termelés megújuló hulladék energiából. (21,8 mFt, tárgyévben befejeződött) A kutatócsoportból 1 fő vett részt.
- OTKA K-71762 Autonóm földi, légi és vízi robotok irányításmélete és mesterséges intelligencia eszközei 2008-10. A kutatócsoportból 1 fő vett részt.
- OTKA T-68370 Robusztus becslési és irányítási algoritmusok 2007-11. A kutatócsoportból 2 fő vett részt.
- EU Leonardo Projekt CZ/6/B/PP 2006-09. E-learning distance interactive Practical Education. 2006-09. A kutatócsoportból 2 fő vett részt.
- A kutatócsoport nem fővállalkozója az első két nagy projektnek (ezért nem szerepeltettük a honlap megfelelő oldalán), de közreműködése meghatározó jelentőségű volt a sikeres befejezésnek.

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

1. Marton L., A.C. Hodel, B. Lantos, J.Y Hung: Underactuated robot control: comparing LQR, subspace stabilization, and combined error metric approaches, IEEE Trans. on Industrial Electronics 55(10): 3724-3730 (2008)
  2. Gáspár P, Z. Szabó, J. Bokor: An integrated vehicle control with actuator reconfiguration In: 17th IFAC World Congress (Ed. ), Seoul, KR, 2008, pp 2087-2092
  3. Keviczky L, Cs. Bányász: On the H<sub>2</sub>, L<sub>2</sub> and H-inf, L-inf optimality of some two-degree of freedom control systems, J. of Systems Science 33(3): 39-49 (2008)
  4. Fazekas Cs, G. Szederkényi, K. Hangos: Parameter estimation of a simple primary circuit model of a VVER plant, IEEE Trans, on Nuclear Science 55(5): 2643-2653 (2008)
  5. Csorba K, I. Vajk: Iterative search for similar documents on mobile devices, Lecture Notes in Artificial Intelligence, 38-45 (2008)
  6. Vajk I: Parameter estimation from noisy measurements, Int. J. of Systems Science 39(4): 437-447 (2008)
  7. Hamar J, I. Nagy, H. Funato, S. Ogasawara, O. Dranga, Y. Nishida: Virtual power electronics: Novel software tools for design, modeling and education, IEEE Trans. on Industry Applications 128(8): 969-978 (2008)
  8. Paire D, M. Cirrincione, M. Pucci, R. K. Jordan, I. Nagy, A. Miraoui: Current harmonic compensation by three-phase converters controlled by space vector modulation In: IECON (Ed. ), Orlando, FL, USA, 2008, pp 2307-2313
- (2008-ban 275 hivatkozást regisztráltak a kutatócsoport munkatársainak publikációira !!!)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Irányítástechnikai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	0,75	Ebből kutató <sup>2</sup> :	0,32
PhD, kandidátus: 3	MTA doktora: 4	levelező tag: 0	rendes tag: 3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			46
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			46
Ebből impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0	idegen nyelven:		10
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		35
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 6,955	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		275
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			275
Magyarul könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Idegen nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 1	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0			ebből külföldön: 0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 45			posztterek száma <sup>10</sup> : 1
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 20	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		6
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			9
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 2	Diplomamunkát: 11	PhD-t:	9
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			56
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			15 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		29 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		5 MFt
Egyéb: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		4 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		14 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## BME KONDENZÁLT ANYAGOK FIZIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Jánossy András, az MTA tagja  
1111 Budapest Budafoki út 8. 1. lh. 1. em.  
Telefon: 463-1391, Fax: 463-3819  
e-mail: atj@szfki.hu

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

A kutatás elsősorban alapkutatás jellegű és a kölcsönható kondenzált anyagok kísérleti, elméleti és számítógépes vizsgálatára irányul. A fő területek

*I. Mágneses félvezetők,*

*II. Molekuláris elektronika,*

*III: Mezoszkópikus és alacsony dimenziójú vezetők és mágnesek*

*IV. Hálózatok és szemcsés rendszerek.*

Az I. II. és III. az EU 7. Keretprogram *Nanoszerkezetek fizikája* témacsoport „Nanotudományok és Nanotechnológiák” területéhez kapcsolódik. A IV. téma az MTA „Természettudományi Prioritásai” közé tartozik.

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

Az elektronok spin-állapotának vezérlése várhatóan jelentős szerephez jut a jövő elektronikai fejlesztéseiben. A legtöbb spintronikai eszköz koncepciója az elektron-spinek nano-skálán történő manipulációján alapul, így a kapcsolódó kvantumfizikai folyamatok megértése elsődleges jelentőségű. A kutatócsoport ezen a területen 2008-ban *mágneses félvezetők* spintronikai jelenségeit vizsgálta. Kiemelkedő eredmény, hogy a saját fejlesztésű Andreev-spektroszkópia módszerrel sikerült nanométeres méretskálán meghatározniuk a töltéshordozók spin-polarizációját. A kontaktus méretének kontrollált változtatásával vizsgálták a ballisztikus típusú transzport diffúzív típusba való átmenetét, valamint a ferromágneses fázis hatását a kvantum-koherencia effektusokra.

A III-V típusú mágneses félvezető anyagokban az alkalmazások szempontjából alapvető fontosságú – és kevésbé értett – az ún. anomális Hall jelenség. A Hall-jelben ez az anomális komponens dominál, és könnyen detektálható információt hordoz az anyag mágneses tulajdonságairól. Az ezen a téren elért kísérleti eredményeket az egyik legnevesebb tudományos folyóiratban, a *Physical Review Letters*-ben publikálták. A néhány tized mikron vastagságú mágneses félvezető rétegek mágnesezettségének közvetlen meghatározására sikeresen alkalmazták az alacsony hőmérsékleti mérés technikához illesztett, saját fejlesztésű magnetooptikai Kerr berendezést.

Kolosszális mágneses ellenállást mutató mangán oxidokon folyó vizsgálataik megmutatták, hogy a töltés- és pályarendezett fázis fluktuációi dominálják az eltérő mágneses és vezetési tulajdonságú, szomszédos alapállapotok (antiferromágneses szigetelő, ferromágneses fém) fölötti paramágneses tartomány kiterjedt régióját magas hőmérsékletekig. Ezek a fluktuációk határozzák meg az egyenáramú transzportot – fontos szerepet játszva a kolosszális mágneses ellenállás mechanizmusában – és az optikai vezetőképesség viselkedését az alacsony energiás tartományban. Az optikai ellipszometria és mágneses-optikai spektroszkópia terén koncepcionálisan új mérés technikákat dolgoztak ki, melyek széleskörű alkalmazásra számíthatnak. A módszerek eredményességét új anyagokon végzett kísérleteik bizonyítják.

A *szén-nanocsövek* nanométer átmérőjű, nagy mechanikai szilárdságú elektromos vezetők és félvezetők. A legfontosabb potenciális alkalmazás a nanoelektronika. A nanocsövek elektromos és mágneses tulajdonságait határozták meg alkáli dópolással. Megmérték a nanocsövekbe zárt paramágneses anyagok magas hőmérsékletű stabilitását.

A spintronikai alkalmazások szempontjából fontos az elektronok fáziskoherenciájának hosszú idejű megőrzése. A fém rétegek spin élettartamának közvetlen mérési módszere a vezetési elektron spin rezonancia (CESR). A vizsgálatok alacsonydimenziós fémek, (a magas hőmérsékletekig szupravezető  $MgB_2$ , a közel egydimenziós szén nanocsövek és a  $Mg_5C_{60}$  fullerén kétdimenziós polimer) spin élettartamát meghatározó mechanizmusok feltárására irányultak.

A mezoszkópikus ill. nanoméretű rendszerek a szilárdtestfizikai kutatások egyik leggyorsabban fejlődő területe. Kísérletileg ellenőrizhető elméletet dolgoztak ki fémekben a mágneses szennyezők körül felépülő elektromos töltéssűrűség-oszcillációk térbeli lecsengésére. Megmutatták, hogy a bozonizáció, ill. az Anderson-Yuval Coulomb gáz módszer alkalmazhatósága az erős csatolású fixpont természetétől függ. Az általuk talált szabály felhasználható a módszerek pontosságának növelésére. Disszipatív kvantumrendszer esetében fázisátalakulást találtak a disszipáció erősségének függvényében. Az egyensúlytól távoli rendszerekben folyó áramokra vonatkozó elméleti vizsgálatokat végeztek. Eredményeik rámutatnak a korábban alkalmazott algoritmusok hibájára.

A szemcsés anyagok mindenütt jelen vannak és technológiai szerepük óriási, tanulmányozásuk az utóbbi másfél évtizedben lendült fel a számítási lehetőségek látványos javulásának köszönhetően. Szemcsés rendszerek statisztikus fizikája területén algoritmust dolgoztak ki állandó nyomáson létrehozott, izotróp torlódott rendszerek előállítására. Vizsgálták, hogy a torlódási elrendezésen alkalmazott perturbáció hatására milyen kritikus erőnél és hogyan indul el a mozgás. A komplex rendszerek elemeinek aktivitását és annak fluktuációit összekapcsoló összefüggésről összefoglaló tanulmányt készítettek. Rendszerek széles körét mutatták be, felvázolták a skálaviselkedéshez vezető lehetséges utakat és megmutatták, hogy milyen módon lehet túllépni az egyszerű fluktuáció-skálázáson. Kapcsolatot tártak fel különböző közösség-azonosító eljárások között. Általánosították a szociális hálózatok leírására korábban bevezetett modellüket.

A Nanotudományok és Nanotechnológiák témacsoporton 14 kutató dolgozott (7 fő AKCs), 55 mFt körüli összes, 35 MFt AKCs ráfordítással, a szemcsés anyagokon 3 fő (3 fő AKCs) 15 mFt összes, 5 MFt AKCs ráfordítással dolgozott.

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

A kutatómunkát nemzetközi együttműködések keretében végezték. Az *elméleti szilárdtestfizikában* egy munkatársuk jelenleg a Bonni Egyetemen (J. Kroha) dolgozik, de University of British Columbia (I. Afflek), a madridi CSIC (F. Guinea), a müncheni LMU (J. van Delft) is szoros együttműködő partnereik közé tartozik. A *szemcsés anyagok fizikájában* fő partnerük a Duisburgi Egyetem (D. E. Wolf). A nem-egyensúlyi rendszerek területén kooperálnak a jülichi FZJ-vel (G. Schütz) valamint a Queen Mary College, Univ. Londonnal (R. J. Harris). A komplex rendszerek vizsgálatánál a Helsinkii Műegyetem (K. Kaski) és a torinói ISI (S. Fortunato) említendő.

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

A kutatócsoport MTA támogatásán kívül OTKA-pályázatok fedezték a működési költségeket. A „Spin-polarizáció nanoszerkezetekben” címmel nagyszámú OTKA kutatási (NK) pályázat keretében a nanoszerkezetek spin-polarizációjának lokális vizsgálatát sikeresen végezték. A „Multifrekvenciás elektron spin rezonancia erősen korrelált fémekben és szupravezetőkben” NK60984 OTKA-pályázaton felújított spektrométerrel szerves vezetőkön kutatási programot indítottak, az első eredmények neves tudományos szaklapban közlés alatt állnak. Ezt a kutatási projektet az OTKA zsűri alacsony színvonalúnak értékelte. Az NK60984 OTKA-pályázatot fél évvel, 2009. május 30-ig meghosszabbították. Két MTA fiatal kutatói álláshelyet és két Bolyai Kutatói Ösztöndíjat nyertek. Ezek az ösztöndíjak teszik lehetővé a fiatal kutatók részvételét a munkában, ezért nélkülözhetetlenek.

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

A kutatócsoport tagjai 2008-as évben 25 tudományos közleményt jelentettek meg referált nemzetközi folyóiratokban. Itt néhány fontosabbat sorolunk fel.

1. Eisler Z, Batos I, and Kertész J: Fluctuation scaling in complex systems: Taylor's law and beyond. *Advances in Physics* 57, 89-142 (2008)
2. Antal A, Lazarovits B, Udvardi L, Szunyogh L, Újfalussy B, Weinberger P: First-principles calculations of spin interactions and the magnetic ground states of Cr trimers on Au(111). *Physical Review B* 77, 174429 (2008)
3. Borda L, Schiller A, Zawadowski A: Applicability of bosonization and the Anderson-Yuval methods at the strong-coupling limit of quantum impurity problems. *Physical Review B* 78, 201301 (2008)
4. Simon F, Dora B, Muranyi F, Janossy A, Garaj S, Forro L et al: Generalized Elliott-Yafet Theory of Electron Spin Relaxation in Metals: Origin of the Anomalous Electron Spin Lifetime in MgB<sub>2</sub>. *Phys. Rev. Lett.* 101, 177003 (2008)
5. Quintavalle D, Borondics F, Klupp G, Baserga A, Simon F, Janossy A et al.: Structure and properties of the stable two-dimensional conducting polymer Mg<sub>5</sub>C<sub>60</sub> *Phys Rev B* 77, (15) 155431 (2008)
6. Nafradi B, Gaal R, Sienkiewicz A, Feher T, Forro L: Continuous-wave far-infrared ESR spectrometer for high-pressure measurements. *J. of Magn. Res.* 195, (2) 206-210 (2008)
7. Demkó L, Kézmárki I, Mihály G, Takeshita N, Tomioka Y, Tokura Y: Multicritical endpoint of the first-order ferromagnetic transition in colossal magnetoresistive manganites. *Phys. Rev. Lett.* 101, 037206 (2008)
8. Mihály G, Csontos M, Bordács S, Kézmárki I, Wojtowicz T, Liu X et al.: Anomalous Hall effect in (In,Mn)Sb dilute magnetic semiconductor. *Phys. Rev. Lett.* 100, 107201 (2008)
9. Kézmárki I, Bordács S: New type of ellipsometry in infrared spectroscopy: The double-reference method. *Appl. Phys. Lett.* 93, 131104 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	12,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	8,33
PhD, kandidátus: 7	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			8
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			25
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			25
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0		idegen nyelven:	25
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 0		idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 86,983		összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	294
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			249
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 15	poszterek száma <sup>10</sup> :		3
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			13
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 3	Diplomamunkát: 2	PhD-t:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			1850
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			43,4 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 2	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		39,6 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			10
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		39,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## BME MŰSZAKI ANALITIKAI KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Horvai György, az MTA levelező tagja  
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.  
Telefon: 463 4056, Fax::463 3408  
e-mail: <http://aak.bme.hu>

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

Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése  
Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások

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

Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése

Gazda-vendég rendszerek szenzorok előállításához

Bór-dipirrol-metén (BODIPY) csoporttal kapcsolt új, enantiomer-tiszta monoazakoronaéter ligandumuk acetonnitriles közegben jelentős off-on típusú fluoreszcens választ ad különböző fémionokra és királis aralkil-ammoniumionokra, de különösen a kalcium- és ólomionokra. Az izobutylcsoportot tartalmazó királis ionofort találták ígéretesnek fluoreszcens ion-szelektív szenzor kialakítása szempontjából.

Molekuláris lenyomatú polimerek (MIP-ek) előállítása, jellemzése

A korábban kidolgozott, nanoreaktorokon alapuló elektropolimerizációs módszerrel felületi kötőhelyekkel rendelkező polimer mikro- és nanorudakat állítottak elő fehérjék imprintelésével és sikeresen alkalmazták modell fehérjék (pl. avidin, anti-IgG) szelektív meghatározására.

Kidolgoztak egy új, nagy áteresztőképességű MIP szintézis és tesztelési módszert. A polimerek előállítása egy membrán mikroszűrőtálca szűrőszálain történik nagyon vékony rétegben. A teljes folyamat a szintézistől a tesztelésig mindössze 2 nap alatt elvégezhető a korábbi 1-2 hét helyett.

Ciklodextrin zárványkomplexek tanulmányozása

Megállapították, hogy egy brazil gyógynövény, az antimikrobiális hatású Lippia sidoides illékony komponenseinek a visszatartása  $\beta$ -ciklodextrinnel nagyobb mértékű, de a termikus stabilitást a maltodextrin-gumiarábikum hordozó alkalmazása jobban segíti.

Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások

Szelektív megkötésre alkalmas ligandumokat alkalmazó szenzorok

Originális szintetikus ionoforral, (kalix[4]aréntetratioamid ligandummal) módosított bizmutfilm elektróddal adszorptív stripping voltammetiás módszert fejlesztettek ki az ólom korábnál érzékenyebb, szelektív meghatározására. A módszer alkalmas környezeti minták ólomtartalmának meghatározására.

DNS könyvtárból in-vitro szelekcióval olyan aptamereket (40 bázis hosszúságú DNS szálak) sikerült kinyerni, amelyek növényi vírusok (almavírus) burokfehérjéinek akár közeli homológjait is szelektíven fel tudják ismerni. Kidolgoztak egy felületi plazmon rezonanciás detektáláson alapuló módszert, amelynek segítségével a növényi vírust valós növényi mintákból ki tudták mutatni.

Szelektív transzporton alapuló nanoszenzorok

Elkezdték a mindössze egy nanopórusos membránok előállítását. Mikroprocesszor kontrollált lézeres kapilláris húzóval kvarc nanopipettákat, illetve fókuszált ionnyalábbal (FIB) való



marással nanopórusos chipet gyártottak. A kvarc nanopipetták esetében a legkisebb átmérőjű nanopórus amit elő tudtak állítani 15 nm, a FIB technika alkalmazásával pedig 30 nm volt.

A fenti nanoszenzor viselkedésének feltérképezésére modellezték az „egy nanopórusos érzékelők” választ. A durva szemcsézettségű molekulamodellezéssel sikerült a kónikus nanopórusokban és azok környezetében immobilizált DNS szálak elektromos térben történő orientációját és az ebből eredő elektromechanikus effektusokat a DNS borítottság és az alkalmazott elektromos tér erő függvényében értelmezni, ami lehetőséget adott korábbi irodalmi eredmények helyes értelmezésére. Közlemény: L. Höfler, R.E. Gyurcsányi *Electroanalysis* 20(3), 301-307, (2008) IF:2,95). Az egy nanopórusos membrán érzékelők egyetlen molekula detektálásra is alkalmasak. Monte-Carlo szimulációval bebizonyították, hogy a kimutatási határt annak valószínűsége határozza meg, hogy a vizsgálandó komponens egy relatív nagy oldattérben megtalálja-e a nanopórust. A nanopórusokon keresztüli iontranszport detektálásának egyik lehetőségeként rendkívül kis kimutatási határú, anyagtranszport kontrollált ionszelektív elektródokat kívánnak alkalmazni. Ezeknek az elektródoknak a robusztussága azonban még nem megfelelő, ezért elektrokémiai eljárást dolgoztak ki az ionofór és az ion-ionofór komplex diffúziós együtthatójának mérésére és megfelelő minőségbiztosítási paramétereket állítottak fel. (Közlemények: S. Bodor, J. M. Zook, E. Lindner, K. Tóth, R. E. Gyurcsányi, *Analyst*, 2008, 133, 635-642, IF:3.553; Zook JM, Buck RP, Gyurcsányi RE, Lindner E, *Electroanalysis*, 20(3): 259-269, (2008), IF: 2,95; Bodor S., Zook J.M., Lindner E., Tóth K., Gyurcsányi E.R., *J. Solid State Electrochem.*, közlésre elfogadva)

Új eljárást dolgoztak ki nM kimutatási határú, ionofór-arany nanorészecske konjugátumon alapuló ezüstion szelektív potenciometriás elektródok (szenzorok) fejlesztésére.

Másodlagos kölcsönhatások szerepének vizsgálata kondenzált fázisok illetve határfelületeik szerkezeti és termodinamikai tulajdonságainak kialakításában számítógépes szimulációs módszerekkel illetve mérésekkel

Új módszert dolgoztak ki és alkalmaztak folyadék-gőz és folyadék-folyadék rendszerek valódi határfelületének meghatározására számítógépes (molekuladinamikai és Monte Carlo) szimulációkban. Ezek a felületek molekuláris léptékben nem síkfelületek, hanem egyenetlenek, érdekesek. Az eddig az irodalomban használt módszerek a felületközelbeli koncentráció- és egyéb változásokat síkmetszetekben számolt összetételekkel írták le, és így hamis képet adtak az egyik legalapvetőbb kémiai jelenségről, az adszorpcióról. Az új módszerrel meghatározható, hogy melyek a közvetlenül a felületen elhelyezkedő molekulák, majd a második és további rétegek. Meg lehet továbbá adni a határfelület érdekességét (ennek jellemzésére is javasoltak egy módszert), a felületi molekulák perkolációját a felületi rétegben, valamint a felületi molekulák határfelülethez viszonyított orientációját, és ennek függését a felület lokális görbületétől. Ki lehet számítani az egyes komponensek molekuláinak tartózkodási idejét a valódi felületi rétegben, illetve ki lehet mutatni a felületi molekulák mikroszkopikus szeparációra és önaggregációra való hajlamát. Az új módszerrel lényegesen eltérő eredményekre jutottak a korábbi ismeretekhez képest olyan fontos esetekben, mint a szabad vízfelület, a metanol-víz elegyek felszíne és a víz-széntetraklorid határfelület. Vizsgálták továbbá – elektrokémikus kollegák számára - a molekuláris oxigén adszorpcióját folyadék-folyadék határfelületeken. (Közlemények: Pártay LB, Jedlovsky P, Vincze A, Horvai G, *J.Phys.Chem.B* 112: 5428-38 (2008), *J.Comput.Chem* 29: 945-56 (2008), *Phys.Chem.Chem.Phys* 10: 4754-64 (2008))

Szintén számítógépes szimulációval vizsgálták acetonnak jég, illetve víznek korom felületén történő adszorpcióját. Meghatározták az adszorpció izotermát illetve az adszorbeált molekulák orientációját. Környezetvédelmi problémák megoldásához tartozó kutatások részeként vizsgálták a modellvegyületként kiválasztott fenol deszorpcióját különböző szén nanorészecskékről a hőmérséklet függvényében (Közlemény: Tóth A, Novák Cs, László K, *Prog. Coll. Polym. Sci.* 135, 148-156 (2008)). Vizsgálták továbbá amorf szilárd fázisok fázisátalakulását (túlhűtött víz), valamint az önaggregációt a víz-karbamid elegyekben.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

#### A magyar és külföldi tudományos akadémiák közötti kétoldalú együttműködés

- Magyar-Észt:modellfehérjékre, avidinre és BSA-ra imprinteltek vezető polimer mikrorudakat, és ezeket sikeresen alkalmazták fluoreszcens protein assay-ekben (megjelent közlemény)
- Magyar-Olasz: epesav sók kétlépcsős aggregációját szimulálták. (megjelent közlemény)
- Magyar-Francia: vízmolekulák aggregációja koromszemcsékre. (megjelent közlemény)

#### Tét-ek

Magyar-francia Tét (FR-18/2007): acetone adszorpciója jégen. (megjelent közlemény)

Magyar-portugál Tét (PT-20/2007): Ópiumszármazékok kölcsönhatásait és a transzportjukat befolyásoló és tényezőket vizsgálták biológiai membránokban

#### Marie Curie projekt 7 európai kutatóhellyel és három céggel:

Két PhD Nyári Iskolán Franciaországban, és egy PhD több hetes gyakorlaton Londonban.

#### Kutatási együttműködések más egyetemekkel

- Abo Akademi University, Finnország; UFRJ, Rio de Janeiro Állami Egyetem, USP, Sao Paulo Állami Egyetem, USC, Sao Carlos Állami Egyetem, UFRN, Natali Állami Egyetem, Brazília; University of Athens, Görögország; Memhis University, USA; Pécsi Tudomány Egyetem, Veszprémi Pannon Egyetem

#### Oktatás egyetemeken

A csoport minden tagja aktívan oktat a BME-n, egy a fenti brazil egyetemeken is.

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

Chemically Modified Synthetic Nanopores for Label-Free Detection of Biomolecular Interactions, OTKA (NF pályázat )

Mycotoxin és allergén fehérje specifikus aptamerek izolálása és alkalmazása, OTKA K

Molekuláris lenyomatot tartalmazó polimerek vizsgálata, OTKA K

Nanomaterials for Application in Sensors, Catalysis and Emerging Technologies, EU (MC)

Szintetikus receptor alapú kémiai szenzorok fejlesztése, tanulmányozása, (OTKA)

Amfipatikus molekulák agregációjának vizsgálata (OTKA)

Molecular Catalysis and Photocatal. at Soft Interfaces: Towards Chemical Fuel Cells (COST)

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

1. Csokai V, Kadar M, Mai DHL, Varga O, Toth K, Kubinyi M, Grun A, Bitter I: Synthesis, optical and electroanalytical characterizations of a thiacalix[4](N-phenylazacrown-5)ether-BODIPY ionophore, Tetrahedron 64(6): 1058-1063 (2008)
2. Gyurcsanyi RE: Chemically-modified nanopores for sensing, Trac-Trends in Analytical Chemistry 27(7): 627-639 (2008)
3. Zsebi Z, Horvath V, Safrany Á, Horvai G: Analytical followup of the gamma initiated synthesis of a molecularly imprinted polymer, Anal.Chimica Acta 608(2): 197-203 (2008)
4. Fernandes LP, Oliveira WP, Sztatisz J, Novak Cs: Thermal properties and release of Lippia sidoides essential oil from gum arabic/maltodextrin microparticles, Journal of Thermal Analysis and Calorimetry 94(2): 461-467 (2008)
5. Pártay LB, Jedlovsky P, Vincze Á, Horvai G: Properties of Free Surface of Water-methanol Mixtures. Analysis of the Truly Interfacial Molecular Layer in Computer Simulation, Journal of Physical Chemistry B 112: 5428-5438 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	3,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,2
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	1
		rendes tag:	1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			24
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			23
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	24
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	63,55	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	622
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			435
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	21	poszterek száma <sup>10</sup> :	18
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	6
		PhD-t:	13
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			858
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			20 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	1	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	35,6 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	19,3 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,3 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,5 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## BME SZERVES KÉMIAI TECHNOLÓGIA TANSZÉKI KUTATÓCSOPORT

Faigl Ferenc, az MTA doktora (Kémiai tudományok doktora)

1111 Budapest, Budafoki út 8.

Telefon: 463 3652, Fax: 463 3648

e-mail: ffaigl@mail.bme.hu

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

A pályázati anyagban megadott munkatervnek megfelelően a kutatócsoport tagjai az alábbi feladatok megoldásán dolgoztak 2008-ban:

- Enantioszelektív reakciók kutatásához modellreakciók királis fázistranszfer katalizátorokkal, valamint új pirrol- és pirrolidingyűrűt tartalmazó királis vegyületek szintézisének kidolgozása.
- Optikai izomerek elválasztási módszereinek kutatása.
- Poláris fémorganikus vegyületek reakcióinak kutatása.
- Szelektív funkcionálizálási módszerek kutatása.

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

- Az optikailag aktív 1-(2-metoxikarbonil-6-trifluorometilfenil)pirrol-2-karbonsav metilészter fenilgyűrűhöz kapcsolódó észtercsoportjának szelektív hidrolízisével kapott félsav-félészterből kiindulva több új, optikailag aktív aminoalkoholt és amid-alkoholt szintetizáltak. Két új optikailag aktív dikarbonsav-származék abszolút konfigurációját határozták meg egykristály röntgendiffrakciós és CD-spektroszkópiás vizsgálatokkal, az MTA KK kutatóival együttműködve. Az arilpirrol-származékok körében kidolgozott borános redukciós módszereket sikerrel alkalmazták gyógyszerhatóanyagok intermedierjeinek enantioszelektív redukciójában. Az ipari együttműködés keretében kidolgozott módszerek alkalmasak lehetnek a két generikus hatóanyag eddigieknél gazdaságosabb előállítására.
- Az enantioszelektív organokatalitikus reakciók kutatásában új királis aminoalkohol típusú katalizátorokat szintetizáltak és alkalmaztak cianometilfoszfonátok és akrilsavszármazékok aszimmetrikus Michael-addíciójában. Legjobb esetben 82% enantiomerfelesleget sikerült elérni. Az  $\alpha$ -amino-ciklopropánfoszfinsavak prekursoraként tekinthető ciklopropán-lakton-származék szintézisére új módszert dolgoztak ki réz, ill. ródiium katalizátorok segítségével. Királis ródiium katalizátor alkalmazásával sikerült csekély (30%-os) enantiomerfelesleget is elérni.

A projekteken a kutatócsoport vezetőjének irányításával 1-1 tud. főmunkatárs és tanácsadó, két doktoráns, egyetemi kollégák és egy technikus dolgozott, a kutatások pénzügyi fedezetét OTKA-pályázat (2,25 MFt) és egy ipari megbízás bevételének egy része (5 MFt) biztosította.

- A királis foszforatomot tartalmazó heterociklusok optikai izomerjeinek diasztereomer komplex-képzéses rezolválására új, az elmúlt évben TADDOL-származékkal végzetthez képest gyakorlati szempontokból előnyösebb módszert fejlesztettek ki kalcium-O,O'-dibenzoil-tartaráttal. Ilyen diasztereomer koordinációs komplexek az irodalomból eddig ismeretlenek voltak. Az új módszer nagy gyakorlati jelentőségű lehet enantioszelektív homogén katalitikus reakciók királis katalizátorainak előállításánál.
- A rezolválási folyamatokban szereplő reagensek hasonló molekulaszervezetének kedvező hatását tanulmányozták aminosavszármazékok körében és megállapították, hogy a

modellvegyületek szubsztituenseinek minősége befolyásolja a kristályosan kiváló diasztereomer kvázi racemát, vagy kvázi konglomerátum karakterét. A kutatási eredményekből PhD-értekezés készült, a védésre várhatólag 2009-ben kerül sor.

A királis megkülönböztetéssel kapcsolatos alap kutatások eredményeit felhasználva valósították meg a gyógyszeripari fontosságú *transz*-2-(3-fenilprop-1-il)ciklohexilamino-2-oxazolin enantiomerek előállítását.

- A rezolválási projekteken két MTA-csoport tag, egy doktoráns, két hallgató és két egyetemi alkalmazott dolgozott. Az új, optikailag aktív foszfolén oxidok konfigurációjának meghatározásában az MTA KK szerkezetkutatói vettek részt. A projekt pénzügyi fedezetét főleg OTKA-pályázatokból (1,5 +0,5 MFt) biztosították.
- A gyógyszeripari felhasználást célzó kutatásokhoz kapcsolódóan több új regioszelektív metallálási reakciót vizsgáltak ipari megbízás keretében. A munka eredményeként hat új, atropizomeriát is mutató pirrolobenzoxazepin-származék szintézisét dolgozták ki és a termékeket a megbízó gyógyszergyárnak biológiai tesztelésre átadták. A munkában két kutatócsoport-tag mellett egy doktoráns és két TDK-zó hallgató vett részt. A kutatásokat főleg ipari megbízásból finanszírozták (5 MFt).
- A nagyszelektivitású funkcionálizálási módszerek fejlesztésének keretében kalix[6]arén alkilezését vizsgálták alkoholokkal, diolokkal Mitsunobu reakcióban. Tanulmányozták a kalix[4]arén és binol származékok komplexképzési tulajdonságait és kísérleteket végeztek nuklein bázisok felismerésére alkalmas receptorok előállítására.  
A heterogén katalitikus hidrogénezési reakciók kutatása során korábban Pd/C jelenlétében benzonitrilből 95%-os szelektivitással sikerült két oldószerfázisú rendszerben benzilamint előállítani. A módszer kiterjeszhetőségét benzil-cianidon is tesztelték, de ekkor csak 45%-os szelektivitást értek el. A szelektivitáscsökkenés okait kvantumkémiailag számításokkal valószínűsítették. Benzil-, illetve tritilsoporttal védett amino- és hidroxioetánok szelektív gyűrűnyitását, valamint *N*-debenzilezését és *O*-detritlezését oldották meg Pd/C katalizátor jelenlétében.  
Új eljárást dolgoztak ki a cariprazine nevű (RGH-188), fejlesztés alatt álló gyógyszer egyik intermedierjének (*transz*-4-aminociklohexilecetsav-etilészter.HCl) előállítására. Az ipari méretben is alkalmazható eljárásról a támogató gyógyszergyár szabadalmi bejelentést tett. A projekteken két kutató mellett TDK-zó és diplomamunka készítő diákok dolgoztak.

A csoport prémiuméves kutatója folytatta a textilszínezékek fotobomlási mechanizmusának feltárását célzó vizsgálatokat.

Az ipar számára kidolgozott új eljárások alkalmazása csökkentheti a gyógyszer-szintézisek kapcsán fellépő környezeti terhelést és az előállított gyógyszerek az életminőség javítását segítik.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport minden tagja szoros együttműködésben dolgozik a befogadó tanszék oktatóival és kutatóival és intenzíven részt vesznek az oktatómunkában. A szerkezet-meghatározásokhoz elengedhetetlen spektroszkópiailag a BME Szeretlen és Analitikai Tanszékével és az MTA KK Szerkezeti Kémia Intézetével kialakított együttműködés biztosítja. A beszámolási időszakban a Chinoin (Sanofi-Aventis), a Richter Gedeon Rt-vel és az Izotópintézet Kft-vel kötött K+F szerződéses munkákban vettek részt a csoport tagjai.

- A fémorganikus területen több éve sikeres együttműködést folytatnak a CNR Firenzei intézetével (Dr. Mordini, A). A kutatócsoport vezetője részt vesz a EU COST D40 akcióban („Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities”), mint a Management Committee magyar tagja.

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

A kutatócsoport tagjai témavezetőként és/vagy kutatóként öt OTKA-pályázat teljesítésében vettek részt. Emellett sikeresen oldottak meg GVOP pályázatokhoz és három ipari K+F szerződéshez kapcsolódó feladatokat.

- Kiemelten sikeres az MTA kutatócsoport és a CNR (Firenze) közötti tudományos együttműködés: 2008-ban jelent meg a közösen szervezett és lebonyolított NATO ASI tanfolyam előadásainak anyagából szerkesztett és írt angol nyelvű szakkönyv. A nemzetközi együttműködések eredményeként az MTA csoport vezetője a COST D40 akció Management Committee tagjaként, 10 európai ország kutatócsoportjaival közösen vesz részt az új nagy szelektivitású katalikus reakciók kidolgozását célzó programban.

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

1. Ujj V, Schindler J, Novak T, Fogassy E. Coordinative resolution of 1-phenyl- and 1-naphthyl-3-methyl-3-phospholene 1-oxides with calcium hydrogen O,O'-dibenzoyl-(2R,3R)-tartrate or calcium hydrogen O,O'-di-*p*-tolyl-(2R,3R)-tartrate *Tetrahedron: Asymmetry* 1973-1977 (2008)
2. Schindler J, Faigl F, Hegedus L, Pálovics E., Fogassy E. A rational synthesis of *trans*-2-(3-phenylprop-1-yl)cyclohexylamino-2-oxazoline enantiomers *Tetrahedron:Asymmetry* **19**, 773-778, (2008).
3. Faigl F, Fogassy, E, Nógrádi, M, Pálovics, E, Schindler, J. Strategies in optical resolution (a practical guide) *Tetrahedron: Asymmetry* 2008, 19, 519-536.
4. Faigl F, Tarkanyi G, Fogassy K, Tepfenhardt D, Thurner A. Synthesis and stereochemical stability of new atropisomeric 1-(substituted phenyl)pyrrole derivatives *Tetrahedron* 2008, 64, 1371-1377.
5. Hegedus L, Máthé T, Kárpáti T. Selective heterogeneous catalytic hydrogenation of nitriles to primary amines in liquid phase Part II. Hydrogenation of benzyl cyanide over palladium, *Appl. Catal. A*: 2008, 349, 40-45.
6. Csokai V, Kádár M, Lan HMD, Varga O, Tóth K, Kubinyi M, Grün A, Bitter I. Synthesis, optical and electroanalytical characterizations of thiacalix[4](N-phenyl-azacrown-5)ether-BODIPY ionophore, *Tetrahedron* 2008, 64, 1058.
7. Grün A, Kerekes P, Bitter I. Synthesis, Characterization and Cation-Induced Isomerization of Photochromic Calix[4](aza)crown-Indolospiropyran Conjugates, *Supramol. Chem.* 2008, 20 (3), 255.
8. Faigl F, Mátravölgyi B, Thurner A. *Novel Methods for the Separation of Optical Isomers*, in *New Methodologies and Techniques for a Sustainable Organic Chemistry* (Eds.: Mordini, A, Faigl, F). NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry, Vol. 246, Springer Berlin, Heidelberg, 2008, pp. 295-315. ISBN-10: 1402067925.
9. Máthé T, Hegedus, L, Czibula L, Juhász B, Nagyné Bagdy J, Márkos D. Eljárás *transz*-4-aminociklohexilecetsav-etilészter.HCl előállítására. P08 00762 sz. magyar szabadalmi bejelentés (Richter NyRt), 2008.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	5,23	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,15
PhD, kandidátus: 3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			22
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			22
Ebből impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0	idegen nyelven:		15
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 4	idegen nyelven:		1
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 30,511	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		363
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			270
Magyarul könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Idegen nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 1	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0			ebből külföldön: 0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 2			poszterek száma <sup>10</sup> : 5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 6	Diplomamunkát: 5	PhD-t:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			676
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			21,5 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		30,1 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			5,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		1 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0,3 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			23 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## BME SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Tóth Bálint, az MTA doktora  
1111 Budapest, Egry József u. 1.  
Telefon: 463-1101, Fax: 463-1677  
e-mail: balint@math.bme.hu

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

A beszámolási időszak a kutatócsoport tevékenységének tizedik éve, egyben a harmadik pályázati ciklus második éve. Az új pályázati ciklussal alapvetően új korszak kezdődött a kutatócsoport életében. Immár PhD-vel rendelkező, a tudományos pályán komoly eredményeket elért, nemzetközileg is ismert kutatók dolgoznak a kutatócsoport alkalmazásában, akik eredményeiket rangos nemzetközi fórumokon publikálják és adják elő. Az új tagoknak a csoport keretében végzett munkája ebben az évben már jelentős számú publikációt eredményezett., így a csoport kutatási eredményeinek minden korábbinál kisebb hányada esik a csoport vezetőjére, és nagyobb a többi tagra. Ez a beszámoló kizárólag a tagoknak az eredeti pályázati kutatási tervben szereplő munkájáról szól. Minden más eredmény – a témához szorosan kapcsolódók is – terjedelmi okból teljesen kimarad.

Lényeges változás továbbá, hogy a csoport vezetését Tóth Bálint immár teljes egészében átvette a nyugdíjba vonult Csiszár Imrétől.

A kutatócsoport keretében – a pályázatnak megfelelően – négy fő területen folyik alapkutatás: Kölcsönható részecske-rendszerek aszimptotikus vizsgálata, Dinamikai rendszerek sztochasztikus viselkedése, Pénzügyi matematika, valamint Információ-elméleti módszerek a matematikai statisztikában.

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

(kutatói team létszáma/ebből a kutatócsoportban)

#### *Kölcsönható részecske-rendszerek aszimptotikus vizsgálata*

Nulla hatósugarú kölcsönhatást mutató részecskék rendszerére (zero range process) alkalmazták azokat a módszereket, amiket korábban az egyszerű kizárásos folyamat esetére fejlesztettek ki, az áram-fluktuációk és a diffúzió vizsgálatára. A stacionárius, állandó rátájú, teljesen aszimmetrikus esetben sikerült bebizonyítani, hogy a karakterisztikán áthaladó áram (ez az igazán érdekes, szokatlanul skálázódó áram-jellegű mennyiség) az idő  $2/3$ -ik hatványával skálázódik, míg a diffúzió az idő  $1/3$ -ik hatványával. Ez az eredmény az ilyen skálázási tulajdonság univerzalitásának bizonyítása irányába mutat olyan egydimenziós kölcsönható rendszerekben, ahol egy megmaradó mennyiség van és a hidrodinamikai fluxus konkáv. Az eredmény egyúttal a teljesen aszimmetrikus egyszerű kizárásos folyamat megjelölt részecskéje karakterisztikához viszonyított helyének szórására is lefordítható, és  $t^{2/3}$ -os skálázást jelent. [2] (2/1)

A stacionárius, teljesen aszimmetrikus egyszerű kizárási folyamat esetén részben új bizonyítást adtak a másodosztályú részecske fluktuációinak korlátaira. Ehhez olyan csatolást alkottak, ami megőrzi a másodosztályú részecskék sorrendjét két olyan rendszerben, amik maguk is koordinátáinként rendezettek. [5] (2/1)

Az előző két eredményhez kapcsolódóan sikerült az aszimmetrikus egyszerű kizárásos folyamatra is megmutatni, hogy a karakterisztikán áthaladó áram az idő  $2/3$ -ik hatványával skálázódik, míg a diffúzió az  $1/3$ -ikkal. Az eljárás során csatolós módszerrel



bizonyították a másodosztályú részecske várható eltéréseire és szórására vonatkozó megfelelő eredményeket. Ezt az eredményt az *Annals of Mathematics* fogadta el közlésre. [4] (2/1)

Az előző eredmények általánosítása érdekében olyan módszert fejlesztettek, amivel modellek egy széles osztályában lehet a  $t^{1/3}$  skálázást bizonyítani a karakterisztikán áthaladó áramok fluktuációira. Az említett osztály olyan aszimmetrikus lerakódási modelleket és konzervatív részecskerendszereket tartalmaz, ahol a fluxus-függvény szigorúan konkáv. A módszer alkalmazhatóságához a másodosztályú részecskékre szükséges kikötni egy feltételt, amit "mikroszkopikus konkávitás"-nak nevezhetünk, a fluxus konkávitásának hatásaival mutatott analógia alapján. A feltétel teljesülése ellenőrizhető bizonyos egyszerű kizárásos folyamatokra és számos nulla hatásugarú kölcsönható folyamatra. [3] (3/1)

#### *Dinamikai rendszerek sztochasztikus viselkedése*

Lokális ergodicitást bizonyítottak olyan egyenletesen hiperbolikus dinamikai rendszerekre, ahol az instabil sokaságokra teljesül egy általánosan használt növekedési tulajdonság. Ez akkor érdekes igazán, amikor a rendszer szakadós, így a Hopf láncok módszerének alkalmazhatósága távolról sem nyilvánvaló. Az említett növekedési tulajdonság általában az exponenciális korrelációlecsengés bizonyítása során jön elő, így elvileg lényegesen erősebb feltétel, mint ami az ergodicitás bizonyításához szükséges. Mégis, vannak rendszerek, amik ergodicitásának bizonyítására más módszer nem ismert. A legfontosabb példák olyan magas dimenziós szóró biliárdok, ahol a szórótestek nem algebrai egyenletekkel megadottak. [1] (3/1)

Bebizonyították, hogy a korrelációlecsengés exponenciális a magas dimenziós szóró biliárdok egy osztályában, Hölder-folytonos megfigyelhető mennyiségekre. A szóban forgó osztály azokból a véges horizontú, sarokpont nélküli szóró biliárdokból áll, amikben a szingularitások halmazára teljesül egy természetes (bár nehezen ellenőrizhető) "szubexponenciális komplexitási feltétel". Ez az eredmény egy tízéves kutatási projekt csúcs-eredménye, és rendkívül fontos, mert bizonyos értelemben ez az első "igazán fizikai" magas (nem kettő) dimenziós szakadós rendszer, amiben matematikailag szigorú módon sikerült exponenciális korrelációlecsengést bizonyítani [6]. A bizonyítás nagy nemzetközi érdeklődést váltott ki, a szerzők a bécsi Ervin Schrödinger Intézet nyári programja keretében egy minikurzuson ismertették a módszert. Az előadás-sorozatról elektronikus jegyzet készült [7]. (2/1)

#### *Információ-elméleti módszerek a matematikai statisztikában*

Bináris felújítási folyamatok esetén vizsgálták a felújításig hátralévő idő univerzális becslésének lehetőségét. Ennek lényege, hogy egyetlen minta (hosszú időn keresztül történő) megfigyeléséből kell következtetéseket levonni, a felújítási idő eloszlásának a-priori ismerete nélkül. A felújítási idő momentumaira tett alkalmas feltevés mellett sikerült becslést adni a következő felújítás várható idejére, valamint feltételes eloszlására. Egy példán keresztül megmutatták azt is, hogy momentum-feltétel nélkül ilyen becslés megadása nem lehetséges. [8] (2/1)

Megszámálható (vagy véges) állapotterű stacionárius sztochasztikus folyamatokban vizsgálták "memóriaszavak" keresésének lehetőségét. Ezek olyan szavak - az állapottér elemeiből, mint ABC-ből, - amelyek ha a folyamat során előjönnek, akkor a folyamat következő eleme feltételesen független a szó megjelenése előtt történetektől (a szó megjelenése, mint feltétel mellett). Egy memóriaszó akkor minimális, ha semelyik végződése nem memóriaszó. A cél a memóriaszavak hosszának meghatározása a folyamatból vett egyetlen (hosszú) minta megfigyelése során. Sikerült megadni egy univerzális becslést, ami majdnem biztosan konvergál a leghosszabb minimális memóriaszó hosszához. Egyúttal

sikerült megmutatni, hogy a legrövidebb memóriaszó hosszára ilyen univerzális becslés megadása nem lehetséges. [9] (2/1)

A társadalmi-gazdasági hasznosságról: az említett kutatások mindegyike alapkutatás.

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

A kutatócsoport tagjai kiterjedt kapcsolatokkal rendelkeznek a következő hazai matematikai műhelyekkel: MTA Matematikai Kutatóintézete, ELTE Matematika Tanszékcsoportjai, MTA SZTAKI. A csoport tagjainak nemzetközi kapcsolatai is számottevőek. Hangsúlyosan kiemelkedőek a franciaországi (Paris, Orsay), hollandiai (Amsterdam, Eindhoven), izraeli (Jeruzsálem) és USA (Atlanta GA, Birmingham AL, Madison WI) kapcsolatok.

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

A tárgyévben a kutatócsoport tagjai az alábbi OTKA-pályázatokban érintettek: T46187, TS49835, K60708, NK63066, F67729, PD73609, K75143. Valószínűleg példátlan az akadémiai kutatócsoportok között, hogy az átlagosan 3,5 főt alkalmazó csoport 3 (nem vezető) alkalmazottjának van önálló, aktív OTKA-pályázata (a felsorolásban az utolsó 3).

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

1. Bachurin P, Bálint P, Tóth IP: Local ergodicity for systems with growth properties including multi-dimensional dispersing billiards, Israel Journal of Mathematics 167: 155-176 (2008)
2. Balázs M, Komjáthy J: Order of current variance and diffusivity in the rate one totally asymmetric zero range process, Journal of Statistical Physics 133(1): 59-78 (2008)
3. Balázs M, Komjáthy J, Seppäläinen T: Microscopic concavity and fluctuation bounds in a class of deposition processes, preprint (2008)
4. Balázs M, Seppäläinen T: Order of current variance and diffusivity in the asymmetric simple exclusion process, Annals of Mathematics accepted (2008)
5. Balázs M, Seppäläinen T: Fluctuation bounds for the asymmetric simple exclusion process, Alea - Latin American Journal of Probability and Mathematical Statistics accepted (2008)
6. Bálint P, Tóth IP: Exponential decay of correlations in multi-dimensional dispersing billiards, Annales Henri Poincaré 9(7): 1309-1369 (2008)
7. Bálint P, Tóth IP: An application of Young tower method: exponential decay of correlations in multidimensional dispersing billiards; notes of the minicourse given at the semester „Hyperbolic Dynamical Systems” at ESI in Vienna, June (2008)  
<http://www.math.bme.hu/~walzer/lecturenotes/balinttoth08esi.pdf>
8. Morvai G, Weiss B: On Universal Estimates for Binary Renewal Processes, Annals of Applied Probability 18(5): 1970-1992 (2008)
9. Morvai G, Weiss B: Estimating the Lengths of Memory Words, IEEE Transactions on Information Theory 54(8): 3804-3807 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Sztochasztika Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	3,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3,5
PhD, kandidátus: 4	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			9
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			9
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0	idegen nyelven:		7
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		1
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 9,34	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		14
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			10
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 1	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 1	jegyzet: 1	1
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 7			poszterek száma <sup>10</sup> : 0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 2	Diplomamunkát: 3	PhD-t:	1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			616
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			15 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		6,7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			6,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## **BME VÍZGAZDÁLKODÁSI KUTATÓCSOPORT**

Somlyódy László, az MTA rendes tagja  
111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.  
Telefon: 463-1530, Fax: 463-3751  
e-mail: somlyody@vkkt.bme.hu

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

A kutatócsoport – az előző évek munkáit folytatva – továbbra is a fenntartható vízgazdálkodás jelenlegi és jövőben várható kérdéseivel foglalkozik. Tevékenységét 2008-ban a következő fő témakörök jellemezték: (a) az EU Víz Keretirányelv hazai megvalósításával kapcsolatos feladatok; (b) az éghajlatváltozás hatása a hidrológiai szélsőségek előfordulására és a vízminőség alakulására; (c) árvízi szabályozás a Tisza vízgyűjtőjén; (d) a nem-pontszerű tápanyagterhelés vízgyűjtő léptéken történő meghatározása, valamint (e) felszíni vizek eutrofizálódásának vizsgálata magyarországi vízfolyásokon és a Balaton Keszthelyi-medencéjében.

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

A kutatócsoport szorosan együttműködik a BME Vízi Közmű és Környezetmérnöki Tanszékével, amelynek keretében működik. A munkák a fentebb említett témakörökben ezen együttműködés keretében közösen folytak.

A vízgazdálkodás egyik jelentős, 2008-ban megkezdett feladata az ország vízgyűjtő-gazdálkodási tervének elkészítése. A tervet készítő konzorciumnak tagja a Tanszék is. A következő feladatokat oldottuk meg: (i) a terv koncepciójának kidolgozása (tartalmi felépítés, jelentős vízgazdálkodási kérdések meghatározása, az intézkedésekre vonatkozó javaslatok), (ii) felszíni és felszín alatti vizeinek ökológiai, kémiai és hidromorfológiai minősítéséhez szükséges módszertan kiegészítése, (iii) a felszín alatti vízkészletek számításához szükséges vízháztartási modell kifejlesztése, (iv) a felszíni vizek tápanyagterhelésében jelentős hányadot képviselő diffúz terhelések pontosabb becslésére és az optimális intézkedések kiválasztására alkalmas modell továbbfejlesztése (részletek a mellékelt rövid tájékoztatóban). A projekt évi költségvetése alvállalkozók nélkül 11,8 millió Ft volt. A munkában 6 fő vett részt, közülük a kutatócsoport tagja 4 fő, 1 fő pedig támogató tag.

Az éghajlatváltozás fizikai és biológiai tényezőkön keresztül egyaránt befolyásolja vizeink mennyiségét és minőségét. Az EU 6. keretprogramja által finanszírozott SCENES projekt célja Európa vízkészleteire vonatkozó vízminőségi-víz mennyiségi forgatókönyvek kidolgozása és átfogó elemzése. A három szinten (európai, regionális és lokális) megvalósuló vizsgálat eredményei alapján módszertani ajánlást dolgoztunk ki a döntéshozók számára. A Tanszék és a Kutatócsoport feladata forgatókönyvek kimunkálása és elemzése a hazai mintaterületre (Felső-Tisza vízgyűjtője), a térség kiemelt problémáinak (árvíz, aszály és vízminőség) előtérbe helyezésével, korszerű modellezési eszközök alkalmazásával. Az elkészült forgatókönyvek képet adnak a vízkészletek megfelelő állapotáról 2025-ig, a Felső-Tisza vízgyűjtőre. A projekt évi költségvetése alvállalkozók nélkül 11,7 millió Ft volt. A munkában 4 fő vett részt, közülük a kutatócsoport tagja 3 fő, 1 fő pedig támogató tag.

Az éghajlatváltozás környezeti kockázatainak és járulékos hatásainak felmérésére indikátorokon alapuló rendszerelméleti hatásvizsgálat készült, amelyben kiemelt szerepet

kaptak a társadalmi-gazdasági hatások. A vizsgálat célja tudományos alapokon álló, a gyakorlatban is alkalmazható eljárások kidolgozása volt. Integrált eszközrendszerrel elemezhető a különböző éghajlatváltozási forgatókönyvek hidrológiai hatásai – az aszályok és árvizek előfordulási gyakorisága és mértéke egyaránt. Az eredmények a különböző éghajlati forgatókönyvek hatásainak feltárása mellett a szélsőséges időjárási helyzetek eredményezte lehetséges katasztrófák (például gátszakadás) kockázatainak elemzését is tartalmazták, valamint gyakorlati javaslatokat adtak a kimutatott összefüggések, folyamatok és tendenciák kezelésére. A projekt évi költségvetése alvállalkozók nélkül 5,3 millió Ft volt. A munkában 3 fő vett részt, közülük a kutatócsoport tagja 1 fő, 1 fő pedig támogató tag.

A Balaton Keszthelyi-medenyében felállított, újratervezett automatikus mérőállomás bővítette a mért paraméterek körét és bekapcsolta a Balatont a világ egészére kiterjedő nemzetközi limnológiai mérőhálózatba (GLEON). Az eredményeket közérthető módon és tudományos igényességgel is ismertető új honlapon szinte azonnali módon nyomon követhetőek a mérési adatok. Az éghajlatváltozás nyomán valószínűen gyakrabban előforduló magas vízhőmérsékletek miatt fokozódó oxigénháztartási problémák és a fitoplankton intenzívebb növekedése várható. A vízminőségi méréseken alapuló küszöb-modellezés kimutatta, hogy csekélynek tűnő átlagos vízhőmérséklet-változás jelentősen növelheti az algacsúcsok megjelenésének valószínűségét. A nagy gyakoriságú mérések új képet nyújtanak a sekélysege miatt jó oxigénellátottságúnak tartott tóban mégis előforduló alacsony telítettségű állapotokról, melyek a vízhőmérséklet várható növekedésével rendszeres jelenséggé válhatnak. A munka saját és tanszéki forrásokból (mintegy 2 millió Ft értékben) valósult meg, a kutatócsoport 2 tagjának közreműködésében.

Az OTKA keretében végzett tiszai fitoplankton kutatás eredményei alapján a Tiszához hasonló nagyságú és morfológiájú folyókban az áramlási holtterek nem befolyásolják számottevően a potamoplankton mennyiségét. A 2000. évi tiszai cianidszennyezés vízminőségi adatait felhasználva lehetővé vált a mérési adatok elemzéséhez használt egydimenziós transzportmodell pontosítása. A Tisza fontosabb mellékfolyóin az éppen a cianidszennyezés nyomán létrehozott automatikus mérőhálózat ([www.rivermonitoring.hu](http://www.rivermonitoring.hu)) lehetővé tette az elemzésbe bevont adatok körének kibővítését. A hidraulikai környezet, valamint a fitoplankton mennyisége és minősége között feltárt kapcsolatok új hipotéziseket eredményeztek a folyók vizében leúszó fitoplankton eredetéről és a vízjárást befolyásoló beavatkozások élővilágra gyakorolt hatásáról. A projekt évi költségvetése alvállalkozók nélkül 3,1 millió Ft volt. A kutatásokat a kutatócsoport 2 tagja végezte el.

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

2008-ban a munkacsoport 3 tagja vett részt az EU 6. Kutatási programja keretében, nemzetközi együttműködésben megvalósuló SCENES projekt kidolgozásában.

A kutatócsoport vezetője az European Environmental Agency Tudományos Bizottságának elnöke és tagja a következő testületeknek: External Advisory Committee of the EU on Global Change, Scientific Committee of the Stockholm World Water Conference, External Advisory Panel of Public Utility Board of Singapore, UN World Water Assessment Technical Advisory Committee, IWA Board of Directors, Editorial Board of Ecohydrology and Hydrobiology. A kutatócsoport egyik tagja részt vesz a felszín alatti vizekkel foglalkozó EU-munkacsoport munkájában. A kutatócsoport munkájában külső megbízással résztvevő kutató egyik vezetője volt az IPCC (a klímaváltozással foglalkozó nemzetközi testület) 3. jelentését elkészítő

csoportnak, így ő is részese az alkotógárdát jutalmazó Nobel-békedíjnak. Mindez közvetlen kapcsolatot jelent a nemzetközi szakmai élethez, biztosítva az információk gyors átvételét.

Oktatási és kutatási kapcsolatok 14 külföldi egyetemmel (Bécs, Graz, Karlsruhe, München, Zürich, Varsó, Prága, Lyngby, Trondheim, Cornell, Brüsszel, Gent, MIT, Florida, Ankara) és a IIASA-val létesültek. A hazai kapcsolatok túlnyomóan a projektek végrehajtásához kötődnek. Szoros együttműködés alakult ki az MTA kutatóhelyeivel (TAKI, Földrajztudományi Kutatóintézet, BLKI, Duna Kutató Állomás), a Corvinus, a Debreceni, a Szegedi, a Szent István és a Veszprémi Egyetemmel, az Országos Meteorológiai Szolgálattal, a VITUKI-val, Környezetvédelmi és Vízügyi Igazgatóságokkal, Nemzeti Park Igazgatóságokkal. A balatoni mérőállomás révén a kutatócsoport tagja a Global Lake Ecological Observatory Network ([www.gleon.org](http://www.gleon.org)) nemzetközi mérőhálózatnak.

A különböző szakmai fórumokon 2008-ban a kutatócsoport vezetője, tagjai és a támogató tagok 21 tudományos (ebből 12 külföldön) és 8 ismeretterjesztő előadást.

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

2008-ban a Tanszék és a Kutatócsoport 1 FP6-os, 1 EU-támogatású hazai, 1 NKTH, 1 OTKA-pályázaton projekt kidolgozásában vett részt. A csoport önálló témával nem rendelkezett. A pályázatok összes 2008-ra jutó költségkerete alvállalkozók nélkül 84 millió Ft volt. Részletek a pályázatokat bemutató mellékletben találhatóak.

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

1. Somlyódy L. (2008) Töprengések a vízről - lépéskényszerben. Magyar Tudomány, 2008/04 462
2. Somlyódy L. (2008) Integrated Modelling Approach to Catchment Management. Singapore International Water Week, 23-27 June 2008, Singapore.
3. Somlyódy L. (2008) Víz a változó világban. Néha a sok is kevés. MTA „A Tudomány az élhető földért” Nyitóelőadás, 2008. november 4. MTA (<http://www.mta.hu/?id=3325>)
4. Istvánovics, V. (2008): The role of biota in shaping the phosphorus cycle in lakes. Freshwater Reviews Vol. 1, pp. 143-174.
5. Istvánovics V., Honti M., Kovács Á. és Osztoics A. (2008). Distribution of submerged macrophytes along environmental gradients in large, shallow Lake Balaton (Hungary). Aquat. Bot. 88, 317-330.
6. Koncsos L. és Balogh E. (2008) Flood disaster mitigation by inundation of the deep floodplain. 4th International Symposium on Flood Defence: Managing Flood Risk, Reliability and Vulnerability. Toronto, Kanada, 2008.05.06-2008.05.08.
7. Kovács Á., Honti M. és Clement A. (2008): Design of best management practice applications for diffuse phosphorus pollution using interactive GIS. Water Science and Technology, Vol. 57, No. 11, pp. 1727–1733.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3,5
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			9
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			9
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	4
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1	idegen nyelven:	4
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	5,089	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	55
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			49
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	12	poszterek száma <sup>10</sup> :	1
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	4
		PhD-t:	1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			86
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			27,8 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	28,9 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,3 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	23,5 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## DE HOMOGEN KATALÍZIS KUTATÓCSOPORT

Joó Ferenc, az MTA rendes tagja  
4010 Debrecen, Pf. 7  
Telefon: 52-512-900, Fax: 52-512-915  
e-mail: fjoo@delfin.unideb.hu

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

- Vízoldható átmenetifém – N-heterociklusos karbén-komplexek szintézisének és katalitikus sajátosságainak vizsgálata.
- A vizes közeg hatásának vizsgálata a katalitikus reakciók mechanizmusára.
- Rögzített (heterogenizált) komplex katalizátorok vizsgálata. Szén-dioxid és karbonátok vizes közegű hidrogénezésének kísérletes és kvantumkémiai vizsgálata.
- Biológiai membránok módosítása katalitikus hidrogénezéssel.

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

Kutatási eredményeiket nemzetközi folyóiratokban *négy* megjelent közleményben továbbá egy könyvfejezetben ismertették, melyek összeített hatástényezője (IF-2007) 10,637.

- Új vízoldható N-heterociklusos karbének (NHC) prekursorait állították elő a) a szubsztituált 1,3-imidazol váz felépítésével; b) az 1,3-imidazol megfelelő N-szubsztitúciójával; c) a katalízisben jelentős szerepet játszó ismert imidazólium sók (Imes, Simes) szulfonálásával. Az új ligandumok felhasználásával több Ag(I)- és Au(I)-NHC komplexet szintetizáltak, melyek közül az arany-komplexek jó katalitikus aktivitást mutattak terminális alkinek hidratálásában. Az új, stabilis, vízoldható komplex katalizátor család jelentős szerepet játszhat a vizes közegű fémorganikus katalízis (benne a két folyadékfázisú katalízis) lehetőségeinek gyakorlati kiaknázásában.
- Nemzetközi együttműködésben különféle allil-alkoholok redox izomerizációját vizsgálták homogén vizes oldatokban ill. vizes-szerves kétfázisú rendszerekben Ru-komplex katalizátorok alkalmazásával. (Az allil-alkoholok redox izomerizációja a karbonilvegyületek előállításának maximális atomhatékonyságú, környezetbarát módja.) Megállapították, hogy mind az ismert hidrogénező katalizátor:  $\text{Na}_4\{[\text{RuCl}_2(\text{mtpms})_2]_2\}$ , mind az újonnan szintetizált  $\text{Na}[\text{Ru}(\text{CO})\text{Cp}(\text{mtpms})_2]$ ,  $\text{Na}_4[\text{RuCl}(\mu\text{-Cl})(\text{C}=\text{C}=\text{CPh}_2)(\text{mtpms})_2]$  és  $\text{Na}_2[\text{RuClCp}(\text{mtpms})_2]$  (mtpms=monoszulfonált trifenilfoszfin, Cp=ciklopentadienil) jó katalitikus aktivitást mutat e reakcióban inert körülmények között, 50-80 °C hőmérséklet-tartományban.
- Ugyancsak nemzetközi együttműködésben vizsgálták az új, vízoldható  $[\text{RuClCp}(\text{mPTA})_2](\text{CF}_3\text{SO}_3)_2$  és  $[\text{RuClCp}(\text{HdmPTA})]$  (mPTA=N-metil-1,3,5-triaza-7-foszfa-adamantán kation, HdmPTA=monoprotonált N,N'-dimetil-1,3,5-triaza-7-foszfa-adamantán kation) komplexek katalitikus felhasználását vizes rendszerekben. Az allil-alkoholok redox izomerizációját az 1-okten-3-ol mellett számos más szubsztrátumra is kiterjesztették. Több esetben meghatározták a reakciósebesség pH-függését. Megállapították, hogy azokban az esetekben, amikor a szubsztrátum redox izomerizációja aldehid termékhez vezet (mint pl. az allil-alkohol reakciójában) a Ru-komplex katalizátor CO-absztrakció révén inaktiválódik.



- Előállították az 1,3,5-triaza-7-foszfa-adamantán kationos N-metil és N-benzil származékait és ezekkel a ligandumokkal több Ru(II)- és Rh(I)-komplexet szintetizáltak és részletesen jellemzték azok szerkezetét. Pozitív töltésüknél fogva ezek a komplexek kationcserélőkre rögzíthetők, ennek megfelelően előállították a Dowex valamint X- és Y-zeoliton heterogenizált komplex katalizátorokat. A rögzített komplexek katalitikus sajátságainak jellemzése folyamatban van, felhasználásukra a Thales Nanotechnology Rt. által kifejlesztett H-Cube hidrogénező készülékben kerülhet sor. További kutatások révén ezek az eredmények közvetlenül is gazdasági hasznot hozhatnak.
- A vizes közegnek a fémorganikus katalitikus reakciók mechanizmusára gyakorolt hatását a szorbinsav (2,6-hexadiénsav) hidrogénezésének példáján vizsgálták. Megállapították, hogy a szabad sav kétfázisú hidrogénezése vizes-szerves oldószerkeletben a vízoldható  $[\text{RhCl}(\text{mtpm})_3]$  katalizátorral gyorsabban és nagyobb szelektivitással játszódott le, mint a K-szorbát hidrogénezése homogén vizes oldatban ugyanezzel a katalizátorral. A jelenség oka az, hogy a szerves fázisba történő extrakció megvédi a többlépéses reakció első lépésében képződő terméket a további hidrogénezéstől, ezáltal megnövekedett a reakció szelektivitása.
- Folytatták a biológiai membránok modelljéül szolgáló foszfolipid liposzómák hidrogénezését és deuteralálását Ir- és Pd-alapú oldható katalizátorokkal.  $^1\text{H}$ - és  $^2\text{D}$ -NMR-spektroszkópiás vizsgálatokkal megállapították a deutérium-beépülés lehetséges mechanizmusát. A biomembránok katalitikus hidrogénezése hozzájárulhat az un. membrán lipid-terápia kifejlesztéséhez.
- A  $\text{CO}_2$  katalitikus kémiját illetően rámutattak arra, hogy a szén-dioxid hidrogénezésével nyert hangyasav a hidrogén tárolásának megfelelő anyaga lehet, s ezzel hozzájárulhat az un. hidrogén-alapú gazdaság megvalósításához. Több Ru-NHC komplex, mint katalizátor alkalmazásával elvégezték a hangyasav katalitikus bontásának vizsgálatát. Távolatilag ezek az eredmények gyakorlati alkalmazást nyerhetnek.
- Nemzetközi együttműködésben kvantumkémiai módszerekkel megállapították alkének  $[\text{Au}(\text{PPh}_3)]\text{OTf}$  által katalizált hidroaminálásának lehetséges mechanizmusát. Igazolták, hogy a folyamatban fontos szerepet játszik egy, a triflát anion által elősegített proton-transzfer lépés.  
Az ismertetett kutatásokban a kutatócsoport három kutatója, egy fiatal kutató továbbá a kutatócsoport-vezető és a DE Fizikai Kémiai Tanszéknek a csoporthoz társult három (a kutatócsoporti pályázatban is nevesített) munkatársa vett részt. A teljes ráfordítás a kutatócsoport költségvetésében (zömmel bérekre) biztosított 15 MFt-ot is beleértve mintegy 22 MFt.
- Az eredmények alapján két PhD értekezés készült el, melyek megvédésére 2009 során kerül sor.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

- A biológiai membránok vizsgálatát az MTA SZBK Biokémiai Intézete munkatársaival, a rögzített fémkomplexek katalitikus tulajdonságainak kutatását részben a Thales Nanotechnology Rt. részben pedig a Szegedi Tudományegyetem munkatársaival, a kvantumkémiai számításokat pedig az MTA Kémiai Kutatóközpont továbbá az Universitat Autònoma de Barcelona kutatóival együttműködésben végezték.
- A D29 és D30 COST Akció továbbá egy FP6 MRTN pályázat (AQUACHEM) keretében 11 ország 16 laboratóriumával álltak az év során kutatási kapcsolatban. MTA-CSIC

támogatással a Zaragozai Egyetem (Spanyolország), TÉT pályázat keretében pedig az Almeriai Egyetem (Spanyolország) munkatársaival végeztek közös kutatásokat.

- A hazai és nemzetközi együttműködésekéből *két* közlemény született az V. részben felsorolt *öt* publikáció közül.
- A Kutatócsoport munkatársai 2007-ben is részt vettek a Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék oktatómunkájában, laboratóriumi gyakorlatok vezetésével (átlagosan 4 óra/fő/hét).

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

A kutatások dologi kiadásait döntő részben a K 68482 ny.sz. NKTH-OTKA-pályázat fedezte. Rövid idejű kutatócserék finanszírozásával jelentősen segítette a nemzetközi együttműködések az MTA-CSIC (Debrecen – Zaragoza) támogatás és a TÉT E-10/2005 pályázat (Debrecen – Almería) valamint a COST D29 és D30 Akció is.

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

1. T. Campos-Malpartida, M. Fekete, F. Joó, Á. Kathó, A. Romerosa, M. Saoud, W. Wojtków: Redox Isomerization of Allylic Alcohols Catalysed by Water-soluble Ruthenium Complexes in Aqueous Systems. *Journal of Organometallic Chemistry*, 693, 468-474 (2008)
2. F. Joó: Breakthroughs in Hydrogen Storage – Formic Acid as a Sustainable Storage Material for Hydrogen. *CHEMSUSCHEM*, 1, 805-808 (2008)
3. A. Udvardy, Á. Kathó: Hydrogenation of Sorbic Acid in Mono- and Biphasic Systems Catalyzed by Rh(I)-Phosphine Complexes. *Reaction Kinetics and Catalysis Letters*, 95, 81-87 (2008)
4. G. Kovács, G. Ujaque, A. Lledós: The Reaction Mechanism of the Hydroamination of Alkenes Catalyzed by Gold(I)-Phosphine: The Role of the Counterion and the N-Nucleophilic Substituents in the Proton-Transfer Step. *Journal of the American Chemical Society*, 130, 853-864 (2008)
5. É. Csajbók, F. Joó: Transition Metal Complex Catalysis in Living Cells. *in Organometallic Chirality* (G. Pályi, C. Zucchi, L. Caglioti, Eds.), Accademia Nazionale di Scienze, Lettere e Arti - Mucchi Editore, Modena, 2008, pp. 69-86.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-DE Homogén Katalízis Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	4	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			5
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			5
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	3
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	2
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	10,637	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	176
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			161
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	0	poszterek száma <sup>10</sup> :	2
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát:	3
		PhD-t:	2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			480
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			15 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	1	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		5,2 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## DE SZÁMELMÉLETI KUTATÓCSOPORT

Györy Kálmán, az MTA rendes tagja  
4010 Debrecen, Pf. 12.  
Telefon: 52-512-900/22751, Fax: 52-536-914  
e-mail: gyory@math.klte.hu

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

A Debreceni Egyetemen egy nagyobb létszámú számelméleti kutatócsoport működik, melynek tagjai közül hat fő volt TKI állományú, rész munkaidőben foglalkoztatott kutató. Az alábbi beszámoló csupán az akadémiai támogatásban részesült kutatók, és a Debreceni Egyetem alkalmazásában álló kutatócsoport-vezetőnek és társ-pályázónak a tevékenységére vonatkozik.

A kutatócsoport kutatási témája: „Diofantikus számelmélet és alkalmazásai”. Kutatásaikat elsősorban a következő területek vizsgálatára koncentrálták: ismeretlen fokszámú binom Thue-egyenletek megoldására szolgáló hatékony algoritmusok kidolgozása, alkalmazások szuperelliptikus egyenletekre, általánosított Fermat-típusú egyenletek és alkalmazásaik számtani sorozatokban található teljes hatványokra, adott diszkriminánsú binér formákkal és adott rezultánsú binér forma párokkal kapcsolatos kvantitatív kutatások, adott fokszámú és adott korlát alatti konstans tagú CNS polinomok és F-tulajdonságú Pisot polinomok eloszlásának vizsgálata, valós együtthatós kontraktív polinomok határpontjainak meghatározására szolgáló algoritmus kifejlesztése, hiperelliptikus görbék egész pontjainak megkeresésére szolgáló hatékony algoritmus kidolgozása, Appell sorozatok gyökeivel kapcsolatos eredmények, S-egységek aritmetikai tulajdonságainak vizsgálata, a számelmélet kriptográfiai alkalmazásai.

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

A kutatócsoport tagjai szinte valamennyi vizsgált területen fontos új eredményeket értek el. Kiemelkedőbb eredményeik a következők:

A végesen generált integritástartományokon korábban általuk bevezetett aritmetikai gráfokra vonatkozóan újabban olyan általános kvantitatív eredményeket nyertek, amelyek fontos új alkalmazásokat eredményeztek rezultáns és diszkrimináns egyenletek vonatkozásában. Minden eddiginél jobb egyenlőtlenségeket bizonyítottak az algebrai számtestek feletti híres ABC-sejtés irányában. Meghatározták binom Thue-egyenletek, valamint ternér egyenletek egy-egy széles osztályának összes megoldását abban az általános esetben, amikor a kitevők is ismeretlenek, az együtthatók pedig ismeretlen S-egységek. A ternér esetben 11-nél nagyobb prím kitevőkre speciális esetként kapták Wiles híres tételét a Fermat-féle egyenletre vonatkozóan. Alkalmazásként áttörést értek el egy régi probléma vizsgálatában. Megmutatták, hogy  $3 < k < 35$  esetén  $k$ -tagú számtani sorozat elemeinek a szorzata nem lehet teljes hatvány. Végességi állításokat nyertek normaforma-egyenletek megoldásainak koordinátaiban található számtani sorozatok hosszával kapcsolatban, valamint adott normájú algebrai egészekből álló számtani sorozatokra vonatkozóan. Lényegesen javították az elliptikus görbék egész pontjainak explicit meghatározására szolgáló, Gebel-Pethő-Zimmer, illetve Stroeker-Tzanakis nevéhez fűződő ún. Ellog algoritmust. A kutatócsoport elméleti kutatásainak közvetlen

gazdasági-társadalmi hasznosíthatóságát is alátámasztva, index formák kriptográfiai alkalmazásának lehetőségét vizsgálták. Javaslatot tettek egy index formákra alapozott hash függvény használatára, melyről belátták, hogy ütközömentes. Az általuk bevezetett hash függvény lavina hatását számítógépes kísérletekkel vizsgálták.

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

A kutatócsoport kutatóhelyi támogatásban részesült tagjai szoros együttműködésben dolgoznak egymással, valamint más debreceni és budapesti számelméletes kollégákkal. Kiterjedt nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Közös kutatásokat folytatnak holland, francia, angol, kanadai, amerikai, német, osztrák és kínai matematikusokkal.

Győry Kálmán, a kutatócsoport vezetője meghívás alapján előadásokat tartott nemzetközi konferenciákon Torontóban, Ostravicében, Budapesten és Sopronban. Közös kutatásokat végzett Jan-Hendrik Evertse holland matematikussal. Pethő Attila előadást tartott Marseilleben, Prágában, Ostravicében, Eszéken, Sopronban, Debrecenben, illetve a Közép-Európai Kriptográfiai konferencián Grazban. Az osztrák-magyar OMA projekt keretében Paul Surer és Jörg Thuswaldner leobeni kutatók látogattak Debrecenbe. Pintér Ákos előadásokat tartott a moduláris formák alkalmazhatóságáról, illetve hatványösszegekkel kapcsolatos új eredményekről a Rényi Kutatóintézetben, Bursában, illetve még 7 különböző koreai valamint japán egyetemen. Hajdu Lajos két hetet töltött Mumbaiban a TATA Institute-ban, ahol eredményeiről előadást is tartott. Továbbá, felkérésre előadást tartott Leidenben, a Robert Tijdeman 65. születésnapja alkalmából szervezett konferencián. A kutatócsoport meghívására Robert Tijdeman Debrecenbe látogatott, mely során több kérdéssel kapcsolatban is közös kutatásokat kezdtek Győry Kálmánnal és Hajdu Lajossal. Bérczes Attila egy hetet töltött a Leideni Egyetemen, ahol közös kutatásokat folytatott Jan-Hendrik Evertsevel. Huszti Andrea tudományos előadásokat tartott Japánban a Niigata és a Nihon egyetemeken, illetve nemzetközi konferenciákon Grazban és Debrecenben. Tengely Szabolcs részt vett a „Rob Tijdeman 65 Symposium and Seminar” konferencián Leidenben. Rakaczki Csaba előadást tartott Sopronban.

A kutatócsoport tagjai a Debreceni Egyetem főállású oktatói, tevékenyen részt vesznek az egyetemi oktató és egyéb munkákban.

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

A kutatócsoport tagjai témavezetőként illetve közreműködőként számos sikeres hazai és nemzetközi pályázat (OTKA, TÉT) vezetői, illetve résztvevői.

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

1. Bérczes A, Pink I: On the diophantine equation  $x^2+p^{2k}=y^n$ , Archiv Der Mathematik 91: 505-517 (2008)
2. Győry K: On certain arithmetic graphs and their applications to diophantine problems, Functiones et Approximatio Commentarii Mathematici 39: 83-108 (2008)
3. Győry K: On the abc conjecture in algebraic number fields, Acta Arithmetica 133: 281-295 (2008)

4. Győry K, Pintér Á: Polynomial powers and a common generalization of binomial Thue-Mahler equations and S-unit equations In: Diophantine Equations (Ed. Saradha N), New Delhi, India, 2008, pp 103-119
5. Hajdu L, Tijdeman R: A criterion for polynomials to divide infinitely many k-nomials, Diophantine Approximations In: Developments in Mathematics 16 (Ed. Schlickewei HP, Schmidt K, Tichy RF), Springer-Verlag, 2008, pp 211-220
6. Huszti A: Generalized Number Systems and Secure Electronic Elections, PhD értekezés, 2008
7. Pethő A, Ziegler V: Arithmetic progressions on Pell equations, Journal of Number Theory 128: 1389-1409 (2008)
8. Akiyama S, Brunotte H, Pethő A, Steiner W: Periodicity of certain piecewise affine planar maps, Tsukuba Journal Math. 32: 197-251 (2008)
9. Akiyama S, Brunotte H, Pethő A, Thuswaldner J: Generalized radix representations and dynamical systems III, Osaka Journal of Mathematics 45: 347-374 (2008)
10. Dujella A, Pethő A, Tadic P: On arithmetic progressions on Pellian equations, Acta Mathematica Hungarica 120: 29-38 (2008)
11. Kirschenhofer P, Pethő A, Thuswaldner J: On a family of three term nonlinear integer recurrences, International Journal of Number Theory 4: 135-146 (2008)
12. Rakaczki Cs: On some diophantine results related to Euler polynomials, Periodica Mathematica Hungarica 57: 61-71 (2008)
13. Tengely Sz: Note on a paper "An Extension of a Theorem of Euler" by Hirata-Kohno et al., Acta Arithmetica 134: 329-335 (2008)
14. Bugeaud Y, Mignotte M, Siksek S, Stoll M, Tengely Sz: Integral Points on Hyperelliptic Curves, Algebra Number Theory 2: 859-885 (2008)
15. Laishram S, Shorey TN, Tengely Sz: Squares in products in arithmetic progression with at most one term omitted and common difference a prime power, Acta Arithmetica 135: 143-158 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-DE Számelméleti Kutatócsoport

Átlagléttség <sup>1</sup> :	3	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
levelező tag:	0	rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			15
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			15
Ebből impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	7
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	8
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	2,745	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	124
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			101
Magyarul könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
idegen nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
levelező tag:	0	rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	ebből külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	32	poszterek száma <sup>10</sup> :	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	13
PhD-t:			9
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			56
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			14 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	37 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	31 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## DE SZÉNHIDRÁTKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Antus Sándor, az MTA levelező tagja  
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.  
Telefon: 52/512-900/22471, Fax: 52/453-436  
e-mail: antuss@tigris.unideb.hu

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

A Debreceni Egyetem-MTA Szénhidrátkémiai Kutatócsoport főleg alapkutatásokkal foglalkozik, amelynek során kémiai és jelentős hányaddal biokémiai, gyógyszerkémiái és immunológiai törvényszerűségek felismerésére is törekszik. Természetesen figyelemmel kíséri a természetes szerves vegyületek szintézismódszereit és szerkezetük vizsgálatát. A kutatócsoport egyik fontos kutatási területe a biológiai szabályozási és felismerési folyamatokban fontos szerepet játszó, negatív töltésű szénhidrátok szulfonsav mimetikumainak előállítása. A kutatócsoport másik célkitűzése a biológiailag aktív természetes anyagok, főleg az O-heterociklusok izolálása, szerkezet felderítése és szintézise, ez utóbbi munka során gyógyszerek fejlesztését elősegítő hatás-szerkezet összefüggések felismerése.

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

A munkatervükben megadottak szerint a tárgyévben is folytatták a biológiailag aktív szénhidrátok és természetes eredetű O-heterociklusos vegyületek kémiája területén végzett kutatásaikat. A munkát széles körű hazai és nemzetközi együttműködés keretében végezték. Legfontosabb eredményeik az alábbiak:

- Számos királis, optikailag aktív O-heterociklusos származék előállítására került sor. Ezek kiroptikai sajátságainak szilárd és oldatfázisban történt beható tanulmányozása lehetőséget teremtett az aromás és a diszulfid kromofor kiroptikai viselkedésével kapcsolatos kutatásaik folytatására (lásd 3. és 4.sz. közlemény).
- Nemzetközi együttműködés (Prof. Dr. K. Krohn, Department of Organic Chemistry, University Paderborn/Germany) keretében folytatták antifungális és antibaktericid hatású O-heterociklusok izolálását, szerkezetfelderítését és szintézisét. E kutatások alaptudományi jelentőségükön túlmenően a hatás-szerkezet összefüggések megállapítása kapcsán új farmakoforok tervezését is lehetővé teszik (lásd 8. 10. és 11.sz. közlemény).
- Folytatták májvédő hatású 1,4-benzodioxán vázas vegyületek szintézise és szerkezetvizsgálata területén végzett kutatásaikat. Értékes megfigyeléseket tettek ilyen típusú vegyületek bioszintézisét, enzimkatalizált rezolválását, valamint optikai tisztaságuk <sup>13</sup>C-NMR-rel történő meghatározását illetően. (lásd 5., 6. és 9.sz. közlemény).
- Megoldották a *Montes engleri*-ből izolált antifungális (*Candida albicans*) hatású prenilezett flavanon származék teljes szintézisét, és újabb megfigyeléseket tettek a hatás-szerkezeti összefüggéssel kapcsolatban. (lásd 7.sz. közlemény).
- Antioxidáns és szabad gyökfogó tulajdonságú rutin (Rutascorbin<sup>R</sup>) analogonokat szintetizáltak (lásd 13.sz. közlemény).
- Előállították a véralvadásgátló tulajdonságú heparin-pentaszacharid szulfonsav analogonjainak diszacharid fragmenseit. Enzimgátlási vizsgálatok szerint a szintetikus szulfonsavmimetikumok a természetes származékokkal azonos mértékben gátolták az 1. típusú foszfatázt. Folytatták potenciálisan neuraminidázgátló szénhidrátszulfonsavak szintézisét (lásd 1.sz. közlemény).



- Előállították a humán fertőzéseket okozó opportunista mikroorganizmusok (*Staphylococcus aureus* és a *S. epidermidis*) antigén tulajdonságú sejtfelszíni poliszacharidláncának oligoszacharid fragmentumait és ezen oligoszacharid-szubsztrátumokon megvizsgálták az antibiofilm hatású diszperzin B enzim hasítási profilját. (lásd 2. és 14.sz. közlemények).
- Megvalósították a *Dictyostelium discoideum* amőba citoplazmájából izolált pentaszacharid 3 feltételezett regioizomerjének szerkezetbizonyító szintézisét. A sejtfelszíni glikoproteinek és glikolipidek szénhidrát részének bioszintézise máig sem teljesen tisztázott folyamat, ennek pontosabb megértésében segíthet az amőba-eredetű pentaszacharid szerkezetének felderítése (lásd 15.sz. közlemény).

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport eredményesen együttműködött az alábbi intézetekkel:

- Department of Chemistry, University of Paderborn (Prof. Dr. K. Krohn): kutatási együttműködés és 2 B.Sc. diplomamunka témavezetése (lásd V.pont 13., 14. publikáció)
- Institut für Mikrobiologie, TU Braunschweig (Dr. B. Schulz, Dr. S. Draeger)
- Dipartimento di Chimica Industriale, Università di Pisa (Dr. G. Pescitelli, Prof. Dr. P. Salvadori)
- DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék (Dr. Kövér Katalin)
- DE OEC Orvosi Vegytani Intézet (Prof. Dr. Erdődi Ferenc)
- DE Mikrobiológiai és Biotechnológiai Tanszék (Dr. Lenkey Béla)
- DE Fizikai Kémiai Tanszék Röntgendiffrakciós Laboratóriuma (Dr. Bényei Attila)
- DE Biokémiai Tanszék (Dr. Kandra Lili, Dr. Gyémánt Gyöngyi)
- Institute of Organic Chemistry, University of Hannover (Prof. Dr. H. Duddeck)

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

A kutatócsoport az elmúlt évben jelentős támogatást kapott az OTKA-tól.

T 049436	4.455 eFt, melyből készletbeszerzés 3.290 eFt
NI 61336	22.100 eFt, melyből készletbeszerzés 1.441 eFt
K 62802	4.000 eFt, melyből készletbeszerzés 1.540 eFt
NK 48798	8.000 eFt, melyből készletbeszerzés 3.100 eFt
PD 73064	3.284 eFt, melyből készletbeszerzés 1.600 eFt

Jelentős eredmények születtek a véralvadást gátló szénhidrátszármazékok szulfonsav mimetikumainak kutatása területén. Előállították a heparin pentaszacharid szulfonsavtartalmú diszacharid fragmentumait és enzimgátlási kísérletekkel vizsgálták biológiai aktivitásukat. Immunológiai szempontból az N-acetil-neuraminsav származékok szintetikus hozzáférhetőségének kidolgozása nagy gyógyszerkémiai jelentőséggel bír. A neuraminsav karboxilcsoportjának metánszulfonsavval történő helyettesítésével nyert vegyület biológiai hatása igen kedvező és a részletes farmakológiai vizsgálatok folyamatban vannak. Számos antibakteriális hatású természetes anyag izolálását és szerkezetfelderítését végezték el. Az antibakteriális hatású O-heterociklusok kutatása területén külön is kiemelendő, hogy a nőgyógyászati területen komoly egészségkárosodást okozó gombák (*Candida*-fajok) ellen hatásos prenilzett flavanonok előállítása és hatás-szerkezet összefüggések felderítése új utakat nyitott meg ilyen típusú nem toxikus készítmények kifejlesztéséhez. Jelentős nemzetközi érdeklődést váltott ki a szilárdfázisban végzett kiroptikai (CD) vizsgálaton alapuló abszolút konfiguráció meghatározási módszerük.

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

1. Z.B. Szabó, A. Borbás, I. Bajza, A. Lipták, S. Antus: A first synthesis of sulfonic acid analogues of *N*-acetylneuraminic acid. *Tetrahedron Lett.* 49(7), 1196-1198 (2008)
2. J. E. Kerrigan, C. Ragunath, L. Kandra, Gy. Gyémánt, A. Lipták, L. Jánossy, J. B. Kaplan, N. Ramasubbu: Modeling and biochemical analysis of the activity of antibiofilm agent dispersin B, *Acta Biol. Hun.* 59 (4) 439-451 (2008)
3. G. Kerti, T. Kurtán, A. Borbás, Z.B. Szabó, A. Lipták, L. Szilágyi, T.-Z. Illyés, A. Bényei, S. Antus, M. Watanabe, E. Castiglioni, G. Pescitelli, P. Salvadori: Synthesis and Chiroptical Properties of (Naphthyl)ethylidene Ketals of Carbohydrates in Solution and Solid State. *Tetrahedron*, 64(8), 1676-1688 (2008)
4. T. Kurtán, G. Pescitelli, P. Salvadori, Á. Kenéz, S. Antus, L. Szilágyi, T.-Z. Illyés, I. Szabó: Circular Dichroism of Diglycosyl Dichalcogenides in Solution and Solid State. *Chirality*, 20(3-4), 379-385 (2008)
5. E.D. Gómez, S. Antus, R. Ferenczi, B. Rys, A. Stankiewicz, H. Duddeck: Enantiodifferentiation by  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR Spectroscopy (Dirhodium Method) – Selectivity of Oxygen Functionalities. *Nat. Prod. Commun.* 3(3), 339-344 (2008)
6. Sz. Nyiredy, Zs. Samu, Z. Szűcs, K. Gulácsi, T. Kurtán, S. Antus: New Insight into the Biosynthesis of Flavanolignanes in the White-Flowered Variant of *Silybum marianum.*, *J. Chromatogr. Sci.*, 46(2), 93-96 (2008)
7. Á. Kenéz, Zs. Lestár, B. Lenkey, S. Antus: Synthesis and Structure-Activity Relationship Study of Monotesone-A, an Antifungal Component of *Monotes engleri*. *Nat. Prod. Res.* 22(5), 383-392 (2008)
8. W. Zhang, K. Krohn, Z. Ullah, U. Flörke, G. Pescitelli, L. Di Bari, S. Antus, T. Kurtán, J. Rheinheimer, S. Draeger, B. Schulz: New Mono- and Dimeric Members of the Secalonic Acid Family: Blennolides A–G Isolated from the Fungus *Blennoria* sp. *Chem-Eur. J.* 14(16), 4913-4923 (2008)
9. K. Kónya, R. Ferenczi, A. Czompa, A. Kiss-Szikszai, T. Kurtán, S. Antus: Kinetic Resolution of 2-Hydroxymethyl-1,4-benzodioxanes by *Pseudomonas fluorescens*. *Arkivoc*, iii, 200-210 (2008)
10. K. Krohn, Md.H. Sohrab, T. van Ree, S. Draeger, B. Schulz, S. Antus, T. Kurtán: Dinemasones A, B and C. New Bioactive Metabolites from the Endophytic Fungus *Dinemasporium strigosum*. *Eur. J. Org. Chem.* 2008(33), 5638-5646.
11. S. Yao, Ch.-P. Tang, Y. Ye, T. Kurtán, A. Kiss-Szikszai, S. Antus, G. Pescitelli, P. Salvadori, K. Krohn: Stereochemistry of atropisomeric 9,10-dihydrophenanthrene dimers from *Pholidota chinensis*. *Tetrahedron: Asymmetry* 19(17), 2007-2014 (2008)
12. K. E. Kövér, T. Beke, A. Lipták, A. Perczel: Combined NMR three-bond scalar coupling measurements and QM calculations to calculate OH-rotamer equilibrium of polyalcohols, *J. Comput. Chem.*, 30, 540-550 (2009) (Online közlés: 2008)
13. S. Müller: Synthesis of D-glucosylated Quercetin derivatives. B.Sc. diplomamunka (2008), Paderborni Egyetem, témavezető: Antus Sándor
14. T. Boray: Synthesis of small fragments of poly-beta-(1-6)-N-acetyl-glucosamine. B.Sc. diplomamunka (2008), Paderborni Egyetem, témavezető: Lipták András
15. Z. B. Szabó, M. Herczeg, A. Fekete, Gy. Batta, A. Borbás, A. Lipták, S. Antus: Synthesis of three regioisomers of the pentasaccharide part of the Skp1 glycoprotein of *Dictyostelium discoideum*. *Tetrahedron: Asymmetry* (2009), közlésre elfogadva

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6,83	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,25
PhD, kandidátus: 3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			40
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			40
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0		idegen nyelven:	11
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 0		idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 23,63		összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	160
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			91
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 1	jegyzet: 0	
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0	<i>ebből</i> külföldön:		0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 12	poszterek száma <sup>10</sup> :		6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 0	Diplomamunkát: 2	PhD-t: 7	
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			170
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			29 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :		41,8 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			5
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		41,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## **ELTE EGERVÁRY JENŐ KOMBINATORIKUS OPTIMALIZÁLÁSI KUTATÓCSOPORT**

Frank András, az MTA Doktora  
ELTE TTK Operációkutatási Tanszék  
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C  
Telefon: 381-2169, Fax: 381-2148  
e-mail: frank@cs.elte.hu

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

Az MTA-ELTE Egerváry Kutatócsoport (EGRES) kutatásainak fő területe a kombinatorikus optimalizálás strukturális és algoritmikus kérdései. A csoport által a kutatási eredmények publikálására létrehozott ISSN 1577-4451 számú EGRES Technical Report sorozatban 2008-ban 15 új publikáció jelent meg, ezek közül 7 szerzői a csoport TKI állományú kutatói. Az eredményeket 2008-ban számos konferencián ismertették a csoport tagjai, ezek közül kiemelendő a tudományterület egyik legrangosabb konferenciájának számító IPCO 2008, ahol a 32 elfogadott előadás közül háromban is a csoport eredményei szerepeltek.

A kutatócsoport kiemelt feladatának tekinti a felsőoktatási képzésben való részvételt, tagjai 2008-ban is részt vállaltak az ELTE matematikus, alkalmazott matematikus és informatikus képzésében. A hetente megtartott Egerváry Szemináriumon, aminek fő célja a kombinatorikus optimalizálás legújabb eredményeinek feldolgozása, több egyetemi hallgató és doktorandusz adott elő. A csoport kutatómunkájába 2008-ban két új doktorandusz kapcsolódott be.

A csoport által kezdeményezett több éves nagyszabású vállalkozás a LEMON diszkrét programozási és modellezési programkönyvtár fejlesztése. 2008 októberében jelent meg a LEMON első stabil verziója, és a csoport szándéka az elkövetkező években folyamatosan bővíteni a könyvtárat a legújabb algoritmusok implementációival. 2008-ban a csoport tagjai részt vettek több alkalmazott kutatási projektben külföldi partnerekkel (France Telecom, Siemens, Konrad Zuse Institut Berlin).

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

Az alábbiakban a csoport beszámolási évben elért kutatási eredményei szerepelnek területekre lebontva, a szerzők és Technical Reportok számával.

**Hálózatok összefüggősége:** A csoport 5 tagja összesen 4 közleményt írt a témában. Sikertelenül bizonyítani egy régóta nyitott sejtést  $(k, l)$ -élösszefüggő irányított gráfok konstruktív előállításáról. Több új eredmény született irányított és irányítatlan hipergráfok összefüggőség-növelésével kapcsolatban, és Edmonds fenyő tételének egy olyan, halmazpárokra vonatkozó absztrakt általánosítása is kidolgozásra került, ami magában foglal több, az utóbbi időben megjelent eredményt.

**Merevség:** A csoport egy tagja egy brit kutatóval együttműködve 3 dolgozatot írt a témában. Új eredményeket értek el a globálisan merev vegyes szerkezetek jellemzésével és előállításával kapcsolatban.

**Matroidok, routing:** A témában egy kutató három közleményt írt, melyekben algoritmusokat adott a tört matroid párosítás feladatra, valamint az egész és félegész csúcs-kapacitásos multifolyam feladatra.

Stabil párosítások: 3 dolgozat született a csoport 4 kutatójának munkája alapján. Sikerült az eddigiéknél jóval egyszerűbb és hatékonyabb algoritmust kidolgozni a részbenrendezéses stabil házasság feladatra – ez az eredmény elnyerte az European Symposium on Algorithms konferencia Best Paper díját. A szuper-stabil párosítás problémára is az eddigiéknél egyszerűbb algoritmus született, a harmadik dolgozat pedig a perfekt gráfok kernel-megoldhatóságáról szóló ismert tételre az eddigiéknél elegánsabb bizonyítást adott és kiterjesztette azt más gráfosztályokra.

A fentiekén túl két dolgozat foglalkozott feladatok algoritmikus bonyolultságával, az egyik bizonyítást adott arra, hogy co-NP-teljes egy vektorhalmazról eldönteni hogy Hilbert-bázis-e, még akkor is, ha legfeljebb 3 méretű hiperélek karakterisztikus vektoraiból áll.

A csoport 2008-ban is részt vett a LEMON nyílt forráskódú diszkrét programozási programkönyvtár fejlesztésében. 2008-ban jelent meg a programkönyvtár első stabil változata; a legfrissebb verzió megtalálható a <http://lemon.cs.elte.hu/> címen.

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

Az ELTE Operációkutatási Tanszékén a csoport tagjai több tárgy oktatásában vettek részt (Egészértékű Programozás, Operációkutatás, Kombinatorikus Optimalizálás). Ezen túl a kutatócsoport szoros kapcsolatokat ápol az ELTE Számítógéptudományi Tanszékével és a BME Számítástudományi és Információelméleti Tanszékével, melyek kutatói rendszeresen részt vesznek a csoport szemináriumán.

Nemzetközi együttműködés keretében a kutatócsoport tagjaival közös kutatásokban részt vettek brit, holland, japán, Hong-Kong-i matematikusok. A csoport tagjai 2008-ban hosszabb időt töltöttek a Cornell egyetemen, Münchenben a Siemens kutatóintézetében, és Berlinben a Műszaki Egyetemen.

A csoport együttműködik a MIK Mobil Innovációs Központ kutatásaival, melyben az ELTE-n kívül a BME és több hazai cég vesz részt, és célja mobil informatikai és telekommunikációs hálózatokban felmerülő feladatok megoldása. A France Telecommal közös kutatási projektben folyik a heterogén hálózatok optimalizálási kérdéseinek vizsgálata.

A csoport tagjai az év során számos előadást tartottak jelentős nemzetközi konferenciákon: IPCO 2008, Bonn Workshop on Combinatorial Optimization, 12th Aussois Combinatorial Optimization Workshop, Kyoto RIMS Workshop on Combinatorial Optimization and Discrete Algorithms, Building Bridges - Fete of Combinatorics and Computer Science, Hiroshima Connectivity Seminar, Oberwolfach Workshop on Combinatorial Optimization.

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

A csoport kutatói részt vesznek az ELTE és a France Telecom R&D 2007 végén kezdődött három éves kutatási projektjében, melynek témája optimális routing heterogén hálózatokban. 2008-ban a projekt fő célja a probléma játékelméleti aspektusainak vizsgálata volt.

A csoportvezető K60802 számú OTKA-pályázatának fő célja a kutatócsoport kutatásainak elősegítése; 2008-ban a csoport tagjainak több külföldi konferencia-részvételét ez a pályázat finanszírozta.

2008-ban fejeződött be a fenti pályázathoz szorosan kötődő OTKA TS049788 tudományos iskola pályázat, melynek keretén belül több, 2008-ban TKI állományú fiatal kutató is pre-

doktori állásban volt korábban a tanszéken. A pályázatnak rendkívül fontos szerepe volt a csoport jelenlegi tagjainak kutatóvá válásában.

A kutatócsoport egy tagja részt vesz az OTKA NK67867 pályázatban, amin belül gráfok kerneleinek tulajdonságait vizsgálja poliéderes eszközökkel.

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

A kutatócsoport egy tagja 2008-ban megkapta az Akadémiai Ifjúsági Díjat, a csoport vezetője pedig 2009. január 22-én átvehette a Szent-Györgyi Albert Díjat. Jelentősebb publikációk:

Benczúr AA, Végh AL: Primal-dual approach for directed vertex connectivity augmentation and generalizations, ACM Transactions on Algorithms 4(2): Article No. 20- (2008).

1. Bernáth A: Source location in undirected and directed hypergraphs, Operations Research Letters 36(3): 355-360 (2008)
2. Bernáth A, Iwata S, Király T, Király Z, Szigeti Z: Recent results on well-balanced orientations, Discrete Optimization 5: 663-676 (2008)
3. Bernáth A, Király T: A new approach to splitting-off, Lecture Notes in Computer Science 5035: 401-415 (2008)
4. Bérczi K, Frank A: Variations for Lovász' submodular ideas In: Building Bridges Between Mathematics and Computer Science (Ed. Grötschel M, Katona GOH), Springer, 2008, pp 137-164
5. Frank A, Király T: A survey on covering supermodular functions In: Research Trends in Combinatorial Optimization (Ed. Cook WJ, Lovász L, Vygen J), Springer, 2008, pp 87-126
6. Frank A, Lau LC, Szabó J: A note on degree-constrained subgraphs, Discrete Mathematics 308: 2647-2648 (2008)
7. Frank A, Végh AL: An algorithm to increase the node-connectivity of a digraph by one, Discrete Optimization 5: 677-684 (2008)
8. Jackson B, Jordán T: Pin-collinear body-and-pin frameworks and the molecular conjecture, Discrete And Computational Geometry 40: 258-278 (2008)
9. Király T, Lau LC: Approximate min-max theorems for Steiner rooted-orientations of graphs and hypergraphs, Journal Of Combinatorial Theory Series B 98: 1233-1252 (2008)
10. Király T, Lau LC, Singh M: Degree bounded matroids and submodular flows, Lecture Notes in Computer Science 5035: 259-272 (2008)
11. Király T, Pap J: Total dual integrality of Rothblum's description of the stable marriage polyhedron, Mathematics Of Operations Research 33(2): 283-290 (2008)
12. Király Z: Better and Simpler Approximation Algorithms for the Stable Marriage Problem, Lecture Notes in Computer Science 5193: 623-634 (2008)
13. Makai M, Szabó J: The parity problem of polymatroids without double circuits, Combinatorica 28: 679-692 (2008)
14. Pap Gy: Packing non-returning A-paths algorithmically, Discrete Mathematics 308(8): 1472-1488 (2008)
15. Szabó J: Packing trees with constraints on the leaf degree, Graphs and Combinatorics 24: 485-494 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	3	Ebből kutató <sup>2</sup> :	2,83
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			24
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			24
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	17
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	3
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	8,02	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	31
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			20
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	18	poszterek száma <sup>10</sup> :	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát:	2
		PhD-t:	1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			70
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			13,4 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	17,1 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7,3 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,8 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## ELTE ELMÉLETI FIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Horváth Zalán, az MTA rendes tagja  
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1.A  
Telefon: 372-2546, Fax: 372-2509  
e-mail: zalanh@ludens.elte.hu

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

A csoport kutatásai a korábbi hagyományokra támaszkodva a részecskefizika, valamint a statisztikus fizika területén folytak. A feladat egyrészt a megkezdett kutatási témák eredményes folytatása, másrészt pedig a kutatásba új területeknek a bevonása volt.

A kutatócsoport tagjai aktívan vesznek részt az egyetemi oktatásban, diplomamunkások és doktoranduszok vezetésében. Számos eredmény született az Elméleti Fizikai Tanszék oktatóival, valamint más intézmények kutatóival való együttműködés alapján. A csoport tagjai alapkutatással foglalkoznak, melyek társadalmi hasznossága a világ, ezen belül a fizikai rendszerek viselkedésének jobb megértése révén jelenik meg, gazdasági hasznossága részben csak közvetetten, részben pedig csak viszonylag hosszú idő múlva nyilvánul meg.

### II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények

#### *Részecskefizikai kutatások*

A csoport egy tagja más intézmények kutatóival kollaborációban foglalkozott az AdS/CFT megfeleltetéssel. Egyre jobban tartja magát az a sejtés miszerint a tízdimenziós  $AdS_5 \times S^5$  görbült háttéren mozgó szuperhúr ekvivalens a négydimenziós  $N=4$  szuperszimmetrikus  $SU(N)$  mértékelmélettel. Ez a dualitás erős-gyenge típusú, vagyis az erősen csatolt mértékelméletet gyengén kölcsönható húrelméletre, míg az erősen kölcsönható húr mozgását perturbatív mértékelméletre képzni le. A dualitás ezen tulajdonsága lehetőséget teremt az eddig elérhetetlen erősen csatolt mennyiségek kiszámolására, viszont lehetetlenné is teszi a két modell összehasonlítását és a sejtés ellenőrzését. Az előrelépést az jelentette, hogy kiderült, mindkét modell integrálható az  $N \rightarrow \infty$  határesetben, így bármelyikük egzakt megoldásával a sejtés igazolható. Habár egzaktul megoldani még egyik modellt sem sikerült, a húrelméletet az erős csatolású tartományban szisztematikusan közelítve sikerült olyan mennyiséget egzaktul kiszámolni, melyet egy perturbatív mértékelméleti számolással lehetett összehasonlítani.

A húrelmélet oldalon kifejezték sokrészecske állapotok energiaszintjeinek Lüscher korrekcióját a végtelen térfogati szórásátrix segítségével. Ezen formula segítségével kiszámolták azon sokrészecske állapotok energiakorrekcióját, melyek ismert mértékelméleti operátorokhoz tartoznak és eredményeiket négyhurok perturbáció számításban kiszámolt anomális dimenziókkal hasonlították össze. Az eredmény tökéletes egyezést mutatott, mely minden eddiginél jobban igazolta az AdS/CFT megfeleltetést.

A szuperhúr mozgásának van egy olyan tartománya, ahol spektrumát közelítőleg meg lehet adni az  $O(6)$  szigma modell segítségével. Ezen megfeleltetést kihasználva sikerült nagy spinű és csavarású Wilson operátorok anomális dimenziójának aszimptotikus viselkedését leírni a szigma modellbeli két hurok perturbációszámítás segítségével.

A csoport másik tagja a peremes formfaktor bootstrapot továbbfejlesztve, meghatározta a sinh-Gordon modell exponenciális operátorainak formfaktorait, módszert adott általános modellekben az operátorok azonosítására, és kidolgozta a kumuláns sorfejtés peremes általánosítását az anomális dimenziók, valamint az operátor normálás meghatározására. Meghatározták továbbá a bulk és a peremes formfaktorok véges méret korrekcióit a térfogat



inverz hatványai szerint minden rendben. A véges méret korrekciókat felhasználva szisztematikus sorfejtést adtak a bulk operátorok véges hőmérsékletű várható értékeire. Hasonló szisztematikus sorfejtést dolgoztak ki a peremes esetre és ennek segítségével kiterjesztették a Leclair-Mussardo sejtést peremes operátorok véges hőmérsékletű várható értékeire. A véges méret korrekciók ismeretében a csonkolt konform állapotér módszerrel nagy pontossággal ellenőrizték a bootstrapból kiszámolt egzakt bulk és peremes formfaktorokat, bulk esetben a skálázó Lee-Yang és a mágneselesen perturbált Ising modellben, peremes esetben a skálázó Lee-Yang modell peremes kiterjesztésében.

A részecskefizika Standard Modellje rendkívül sikeresen írja le az összes nagyenergiás kísérletet. A nagy nemzetközi együttműködésben, magyar részvétellel induló LHC (Large Hadron Collider, CERN, Genf) kísérlet egyik fő feladata a Standard Modell szimmetriasértő szektorának a kísérleti feltérképezése. A Standard Modell egyetlen hiányzó részecskéje a szimmetriasértésért felelős Higgs bozon, amely a modell elméleti problémáinak többségéért (pl. hierarchia probléma) is felelős. Ezért különösen fontos alternatív modelleket vizsgálni és azok kísérleti jóslatait összevetni az eddigi és a tervezett kísérletekkel. A csoport tagjai erősen kölcsönható fermionokra épülő dinamikai szimmetriasértő modellt javasoltak az elektrogyenge kölcsönhatások Standard Modelljének alternatívájaként. A modellben a Higgs részecskét és kölcsönhatásait két új fermionra és effektív négyfermion kölcsönhatásaikra cserélték ki. A modell újdonsága, hogy a modellben nem királis fermionok kondenzátumai sértik az elektrogyenge szimmetriát, ezáltal elkerülve a dinamikai szimmetriasértő modellek főbb problémáit. 2008-ban ez elmélet, többek által is vizsgált, általánosított változatából a csoport tagjai kiszámolták az elektrogyenge precíziós mennyiségeket, és összevetették a kísérleti eredményekkel. Meghatározták az elmélet lehetséges paramétertartományát. Javaslatuk továbbra is a nagy erővel kutatott szimmetriasértés egy lehetséges elmélete. A LEP kísérletekkel összhangban levő új részecskék nagy számban keletkezhetnek az LHC-n.

#### *Statisztikus fizikai kutatások*

A csoport egy másik tagja a Genfi Egyetem Fizika Tanszékének munkatársaival elméletet dolgozott ki csapadékmintázatok időben változó elektromos áramokkal történő kontrolljára. A módszert működését a BME Fizikai és az ELTE Kémiai Intézet munkatársaival együttműködve kísérletileg demonstrálták, például olyan térben periódikus mintázatot hoztak létre, amelynek hullámhosszát kontrollálni lehet megfelelően választott árammal. Azt is megmutatták, hogyan lehet tetszőleges információt kódolni a mintázatok vezérelhető részleteiben. Ez a kutatás még az "alapkutatás" stádiumban van, s a mintázatok jelenleg még csak a 100 mikron skálán szabályozhatók. Ha sikerül kisebb skálákra eljutni, akkor a módszernek jelentős perspektívái lehetnek a mikroszkópikus struktúrák építésében, azaz gazdasági alkalmazásokban is.

Egy Marie Curie ösztöndíjas angol vendégkutatóval együttműködve vizsgálták az extrém statisztikák határeloszlástól való eltérését véges mennyiségű adathalmazok esetén. Renormalizációs módszert vezettek be a független, azonos eloszlással rendelkező, véletlen változókra, és megmutatták, hogy a változók univerzalitási osztályai felbomlanak a véges adathalmaz konvergenciája kitevőinek megfelelően, ami meghatározta a korrekciós függvény alakjának vezető rendjét. Azt találták, hogy a szubkritikus korrelált rendszerekben  $1/\alpha$  ( $\alpha < 1$ ) stacionárius zaj esetén a változók eloszlása jól megegyezik a szimulációs eredményekkel. Azt találták továbbá, hogy az erősen korrelált tartományú  $1/\alpha$  ( $\alpha > 1$ ) zaj esetén a függvény alakjának korrekciója magából a határeloszlásból kapható meg. A módszer segítségével sikerült a megjelenő véges méret korrekciókat (amelyek a matematikai irodalomban eléggé szétszórtaan találhatók) kompakt és elegáns módon, fizikusok számára is érthetően összegezni.

A spinüveg térelmélet egyik megoldatlan problémája, hogy a fizikai dimenziókban létezik-e üvegátalakulás külső mágneses tér jelenlétében, azaz hogy az ún. "Almeida-Thouless átalakulás" - ami az átlagtér-elmélet egyik alapvető következtetése - jelen van-e a felső kritikus dimenzió,  $d=6$  alatt. Ezzel kapcsolatban a téma irodalmában megalapozatlan állítások uralkodtak el, a csoport egy másik tagja a perturbatív renormálási csoport segítségével tisztázza ezt a kérdést: az Almeida-Thouless átalakulás nem tűnik el, bár a fázisdiagramm jellege némileg megváltozik az átlagtér-elmülethez képest.

A rendezetlen rendszerek önátlagoló mennyiségeinek (szabadenergia, belsőenergia, stb.) az extenzív tag utáni korrekciójának mintáról-mintára való ingadozása vizsgálható a replika-térelmélet keretében. A szabadenergia  $n$  replikaszámtól való függése fundamentális egyenlet, ennek Legendre transzformáltja információt ad a szabadenergia fluktuációról. Az ezzel kapcsolatos munka jelenleg befejező fázisában van.

A csoport egy tagja szilárdtestfizikusokkal való kollaborációban kutatásokat végzett párhuzamos éldiszlokációk statisztikus leírása területén. Egyenletet vezettek le a korrelációs függvények időbeli fejlődésére és szoros kapcsolatot találtak az egyetlen él körül kialakuló diszlokációkat leíró eredmények között. A korrelációs függvények ekvivalenciáját szimulációs eredményekkel demonstrálták.

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

A csoport tagjai együttműködnek egy sor hazai kutatóhellyel (BME Fizikai Kémia Tsz., KLTE, KFKI MFA és RMKI). Az ELTE-n folyó oktatásban is mindenki részt vesz szemeszterenként egy tantárgy oktatásával, vagy pedig heti 3-4 óra gyakorlattartással.

A csoport tagjai széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Ezek közül kiemelendők azok, ahová a kutatók hosszabb tanulmányutakat tettek, illetve ahonnan kutatók érkeztek látogatóba: Berni és Genfi Egyetem, valamint a CERN Svájcban, az ICTP Olaszországban, Grenoble-i Egyetem, Paris-Sud Egyetem és CEA-Saclay Franciaországban, a Krakkói Jagelló Egyetem, valamint a Koreai APCTP.

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

A csoport két tagja témavezetőként vesz részt OTKA-pályázatban. Kutatási eredményeikről több cikk jelent meg referált folyóiratban. Résztvevőként többnyire mindenki szerepel különböző OTKA-pályázatokban.

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

1. Z. Bajnok, Chaiho Rim, Al. Zamolodchikov: Sinh-Gordon boundary TBA and boundary Liouville reflection amplitude, Nucl. Phys. B796 622-650 (2008).
2. G. Cynolter, E. Lendvai: Electroweak Precision Constraints on Vector-like Fermions, Eur.Phys.J.C58: 463-469 (2008), (e-Print: arXiv:0804.4080 [hep-ph]).
3. G. Györgyi, N. Moloney, K. Ozogány, and Z. Rácz: Finite Size Scaling in Extreme Statistics, Phys. Rev. Lett. 100, 210601 (2008).
4. I. Bena, M. Droz, I. Lagzi, K. Martens, Z. Rácz, A. Volford: Designed Patterns: Flexible Control of Precipitation through Electric Currents, Phys. Rev. Lett. 101, 075701 (2008)
5. G. Takács: Finite temperature expectation values of boundary operators, Nucl. Phys. B805: 391-417, 2008. (arXiv: 0804.4096 [hep-th])
6. T. Temesvári: Almeida-Thouless transition below six dimensions, Phys. Rev. B78, 220401(R) (2008). (arXiv:0809.1839)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6,5	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6,5
PhD, kandidátus: 5	MTA doktora: 1	levelező tag: 1	rendes tag: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			21
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			16
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul: 0	idegen nyelven:		16
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 0	idegen nyelven:		0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 64,804	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :		173
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			154
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 0	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0			<i>ebből</i> külföldön: 0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 3			posztterek száma <sup>10</sup> : 0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 2		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 2	
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			8
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 2		Diplomamunkát: 3	PhD-t: 4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			905
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			39,9 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 1		Teljes saját bevétel <sup>16</sup> : 4,4 MFt	
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			3,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0,7 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> : 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból: 0		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt	
Egyéb: 0		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány: 0 MFt	
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## ELTE FEHÉRJEMODELLEZŐ KUTATÓCSOPORT

Perczel András, az MTA doktora  
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.  
Telefon: 209-0555, Fax: 372-2592  
e-mail: perczel@chem.elte.hu

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

Kísérleti és számítási módszerekkel vizsgálták fehérjék és fehérje-építőkövek szerkezetét, dinamikáját, szerveződését, és kölcsönhatásait a fehérjefunkció és -működés magyarázata céljából. Új, potenciálisan biológiailag aktív kismolekulák, elsősorban heterociklusos és fémorganikus vegyületek szintézisét és komplex szerkezetvizsgálatát valósították meg.

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

#### *A fehérjék építőelemeinek szerkezete és szerveződése*

*Ab initio* és DFT számításokkal vizsgálták a kollagénben megtalálható hármashélix szerkezeti elem konformációját és annak függését az aminosav-szekvenciától. Eredményeik alapján a módszer alkalmazható a molekulatervezésben [1] (Részvétel: 2/2 fő, 100%<sup>1,2</sup>). Elvégezték az immunosuppresszív és mérgező peptidekben, a kollagénben és életfontosságú enzimekben is előforduló Pro-Pro motívum konformációs analízisét polarizálható kontinuum modell számításokkal. A különböző konformációkra számított populációk jól egyeznek a kísérleti adatokkal. (Részvétel: 1/2 fő, 50%)

Az önszerveződő peptid-nanocsövek *ab initio* vizsgálata rávilágított, hogy az enzimeknek ellenálló  $\beta$ -peptidek a természetes peptideknél stabilabb nanocsöveket alkotnak, amelyek változatos szerveződésűek lehetnek. (Részvétel: 4/4 fő, 100%<sup>2</sup>) A  $\beta$ -alaninokból álló különböző kollagén-szerű szerkezetek vizsgálata során összefüggéseket állapítottak meg a nanocsövek szerkezete és stabilitása között (Részvétel: 4/3 fő, 90%).

A Tc5b nevű 20 aminosavas minifehérje esetén NMR módszerekkel vizsgálták a konformációs stabilitást befolyásoló szerkezeti tényezőket. Mutációval sikerült a feltekeredésben fontos sóhidat befolyásolni és a stabilitást növelni [2] (Részvétel: 2/6 fő, 40%<sup>2</sup>)

#### *Potenciálisan biológiailag aktív molekulák szintézise és vizsgálata*

Biológiai vizsgálatok céljaira változatosan funkcionális heteroaromás gyűrűt tartalmazó vegyületeket állítottak elő. Kondenzált tetraciklusos vegyületek gyűrűtágulási reakcióit vizsgálva új tetrahidropirazolo-benzodiazonin-8-on- és pirazolo-benzodiazocin-7-on származékokat szintetizáltak és vizsgáltak IR, és komplex NMR spektroszkópiai, röntgenkristallográfiás és DFT számítási módszerekkel. Meghatározták konformációjukat, gyűrűinverziójukat, ennek kinetikai paramétereit a szubsztituensek és a gyűrű tagszámának függvényében. Az eredmények hozzájárulhatnak az új molekulák kémiai reaktivitása, konformációs viszonyai és receptor-kötő sajátosságai közötti összefüggések mélyebb megértéséhez [3] (2/6 fő, 80%).

<sup>1</sup> Résztvevő kutatócsoporti tagok és általuk vezetett hallgatók, PhD-hallgatók száma/összes résztvevő kutató, kutatócsoporti részesedés

<sup>2</sup> Saját kutatólaboratórium

Különböző kötésrendszerekkel jellemezhető, új típusú palládium komplexeket állítottak elő ferrocénszubsztituált heteroaril-hidrazonok palladálásával. NMR vizsgálatokkal tisztázták a palládium(II)-centrum koordinálódásának módját az oldószer és a ligandum konstitúciójának függvényében, tanulmányozták a komplexek katalitikus aktivitását az iparban is széles körben alkalmazott reakcióknál (2/3 fő, 80%).

Az antibakteriális, rák- és leukémia ellenes hatású, természetes eredetű fitoalexinek szintetikus analógjaiként előállított új, 1,3-tiazino[5,6-b]indol-vázis heterociklusok szerkezetigazolását végezték el NMR spektroszkópiai módszerekkel [4] (2/5 fő, 30%).

#### *A fehérjefunkció szerkezeti és dinamikai vonatkozásai*

A kalpain enzimaktivitását a kalpasztatin inhibitor szabályozza kalciumfüggő módon. NMR-módszerek segítségével felderítették, hogy a konformációsan rendezetlen (IUP) kalpasztatin eddig egyedülálló módon három konzervált régiójával kötődik, amelyeket hajlékony régiók kötnek össze. (Részvétel: 2/9 fő, 70%). A szabad kalpasztatin konformációjának és dinamikájának vizsgálatával korlátozottan hajlékony, részlegesen hélix konformációjú elemeket azonosítottak a kalpainhoz kötődő régiókban. Következtetéseik a kaplain/kalpasztatin molekuláris felismerés mechanizmusán túl az IUP fehérjékre általánosan is alkalmazhatók [5] (Részvétel: 2/4 fő, 80%).

A miozin motorfehérje működési ciklusában az ATP hidrolízis utáni lépések mechanizmusának vizsgálatát végezték el enzimkinetikai módszerekkel [6] (Részvétel: 1/7 fő, 50%). Az acilpeptid hidroláz esetén szintén az enzimmechanizmust vizsgálták enzimkinetikai és röntgendiffrakciós módszerekkel. Felderítették, hogy a katalitikus apparátusban közvetlenül részt nem vevő, konzervált His367 szerepe annak a hurokrégióknak a stabilizálása, ami az oxianion helyet is tartja (Részvétel: 3/5 fő, 50%).

A memóriában és tanulásban szerepet játszó prolin-oligopeptidáz enzim és új nanomoláris aktivitású inhibitorainak a kölcsönhatásait vizsgálták röntgendiffrakcióval. Eredményeik szerint az inhibitorokban található összekötő régió ideális hossza az inhibitor aromás gyűrűrendszerének alakjától függ [7] (Részvétel: 2/9 fő, 35%).

A C1r a veleszületett immunválasz eleme, autoaktivációja immunreakció elindításában játszik fontos szerepet. Röntgendiffrakciós vizsgálataik alapján lehetőség nyílt az autoaktiváció mechanizmusának részletesebb megértésére (Részvétel: 3/10 fő, 50% [8]).

#### *A fehérjék és peptidok szerkezetvizsgálati módszereinek fejlesztése*

A fehérjék és peptidok NMR módszerrel történő vizsgálata céljából sejtmentes fehérje translációs rendszer tervét publikálták, ami lehetővé teszi jelölt aminosavak irányított beillesztését a szekvenciába [9] (Részvétel: 1/3 fő, 33%). Az NMR szerkezetmegoldás meggyorsítását szolgálja az az újonnan létrehozott szerver, ami az NMR távolságkényszerek segítségével a fehérje feltekeredésének gyors jóslását végzi [10] (Részvétel: 2/4 fő, 60%). Részt vettek egy új királis akridino-18-korona-6-éter alapú oszloptöltet kifejlesztésében és királis elválasztás céljából való tesztelésében (Részvétel: 1/8 fő, 20%).

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

2008-ban is folytatódott a kutatócsoport együttműködése az SZBK Enzimológiai Intézet több kutatócsoportjával, az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoporttal és az SZTE Gyógyszerkémiai Intézetével. A Lechesteri, Heidelbergi és Oszakai Egyetem, valamint a CHINOIN és az MTA-BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport munkatársaival együttműködésben egy-egy

publikáció született. Külföldi kapcsolataik közül kiemelendő a kolozsvári Babes-Bolyai Egyetem Szerves Kémiai Tanszékével, valamint az Oxfordi Egyetem munkatársaival való együttműködés. Részben szintén külföldön történtek az NMR (Frankfurt, az EU-NMR FP6 pályázatban konzorciumi tag) és röntgendiffrakciós kísérletek (DESY, Hamburg, ESRF, Grenoble).

A kutatócsoport tagjai kötelező és speciális kollégiumok, valamint gyakorlatok tartásával részt vesznek az ELTE vegyész, biológia és kémia BSc- és PhD-képzésében. A kutatócsoporthoz köthető 2 PhD-értekezés és 2 diplomamunka (az egyik nívódíjas szakdolgozat) védeése és 3 hallgató vett részt TDK-konferencián. Vezetésük alatt további 3 diákörös hallgató és 5 PhD-hallgató dolgozott.

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

A 2008-ban az Akadémiai Beruházási Keret terhére új röntgendiffrakciós berendezést rendeltek meg. A következő témakörökben voltak folyamatban OTKA-pályázatok, amelyekben a kutatócsoport tagjai vezetők: szerin oligopeptidázok (NK67800), ferrocénszármazékok és heterociklusok (K68887), immunrendszer fehérjéi (F67937). Egy folyamatban lévő OTKA iskolapályázatban résztvevők (NI68466). A kutatócsoport által elnyert 2008-ban induló OTKA-pályázat a fehérjefeltekeredés témakörében: K72973.

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

1. Pálfi VK, Perczel A: How stable is a collagen triple helix? An ab initio study on various collagen and b-sheet forming sequences, *J Comput Chem* 29: 1374-1386 (2008)
2. Hudáky P, Stráner P, Farkas V, Váradi Gy, Tóth G, Perczel A: Cooperation between a salt bridge and the hydrophobic core triggers fold stabilization in a Trp-cage miniprotein, *Biochemistry* 47: 1007-1016 (2008)
3. Gyömöre Á, Kovács Z, Nagy T Zs, Kudar V, Szabó A, Csámpai A: DNMR, DFT and preparative study on the conformation of (Z)-4,5,6,7-tetrahydropyrazolo[1,5-e]benzo[g][1,5]diazonin-8-ones and (Z)-4,5-dihydropyrazolo[1,5-d]benzo[f][1,4]diazocin-7(6H)-ones, *Tetrahedron* 64: 10837-10848 (2008)
4. Csomós P, Fodor L, Bernáth G, Csámpai A, Sohár P: Synthesis of 4-thiaharmalan analogue 4-aryl-1,3-thiazino[5,6-b]indole derivatives by prevention of rearrangements to position two of the indole moiety, *Tetrahedron* 64: 8646-8651 (2008)
5. Kiss R, Kovács D, Tompa P, Perczel A: Local structural preferences of calpastatin, the intrinsically unstructured protein inhibitor of calpain, *Biochemistry* 47: 6936-6945 (2008)
6. Gyimesi M, Kintses B, Bodor A, Perczel A, Fischer S, Bagshaw CR, Málnási-Csizmadia A: The mechanism of the reverse recovery step, phosphate release, and actin activation of dictyostelium Myosin II, *J Biol Chem* 283: 8153-8163 (2008)
7. Kánai K, Arányi P, Böcskei Zs, Ferenczy Gy, Harmat V, Simon K, Náray-Szabó G, Hermezy I: Prolyl oligopeptidase inhibition by N-acyl-propyrrolidine-type molecules, *J Med Chem* 51: 7514-7522 (2008)
8. Kardos J, Harmat V, Palló A, Barabás O, Szilágyi K, Gráf L, Náray-Szabó G, Goto Y, Závodszy P, Gál P: Revisiting the mechanism of the autoactivation of the complement protease C1r in the C1 complex: Structure of the active catalytic region of C1r, *Mol Immunol* 45: 1752-1760 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	3,2	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3,2
PhD, kandidátus: 3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			19
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			19
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ, térkép magyarul: 0		idegen nyelven:	19
nem impakt fakt. publikáció magyarul: 0		idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> : 67,677		összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	130
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			75
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz: 0	könyvfejezet: 0	jegyzet: 0	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD: 2	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> : 0		<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> : 4		poszterek száma <sup>10</sup> :	6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
TDK-munkát készítő hallgatók száma: 1	Diplomamunkát: 1	PhD-t:	2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			599
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			15 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> : 1		Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	31,5 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			5
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		31,5 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup>			0
EU-forrásból: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Egyéb: 0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## ELTE GEOLÓGIAI, GEOFIZIKAI ÉS ŰRTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Haas János, a földtudomány doktora  
1117 Budapest, Pázmány sétány 1/c  
Telefon: 381 2127, Fax: 381-2128  
e-mail: haas@ludens.elte.hu

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

A kutatócsoport folytatta kutatásait a Kárpát-medence geológiai szerkezetének és aljzatát felépítő geológiai képződményeinek megismerése és a tágabb régióval való összevetése céljából. Közreműködtek az ország geotermikus viszonyainak áttekintésében, vizsgálták a mélységi hőmérséklet-eloszlást és a hidrogeológiai viszonyokat, elemezték a kitermelés technológiai lehetőségeit és korlátait, felvázolták a geotermikus energiafelhasználás növelésének lehetőségeit és stratégiáját. Folytatták a földköpeny-konvekció numerikus modellezését, vizsgálva a konvekció geometriáját és a hőtranszport jellegét. Alfa- és gamma-spektrometriás méréseket, urán-soros radiometriai kormeghatározásokat végeztek, és fejlesztették a transzurán izotópok mérés technikáját. Folytatták a távérzékelés, a műholdas adatokra építő eljárások kidolgozását a geokockázat – kiemelten a szeizmicitást meghatározó vagy azzal összefüggő tényezők – nyomon követése érdekében.

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

A londoni Geological Society kiadásában megjelent a „The Geology of Central Europe” c. összefoglaló két kötetes regionális geológiai kézikönyv, amelyben a perm és a triász fejezetek társszerzője a kutatócsoport vezetője. A kutatócsoport vezetőjének koordinálásával, számos intézmény (Magyar Állami Földtani Intézet, MOL Nyrt, Mecsekérc Zrt) szakembereinek közreműködésével elkészült, lektorálás alatt van Magyarország új medencealjzat térképe, amely a képződmények értékelését tartalmazó adatbázissal együtt a digitális földtani térmodell meghatározó jelentőségű elemét képezi. A térkép kiemelkedő jelentőségű a geotermikus energia-potenciál, továbbá a felszín alatti vízkészletek felmérése szempontjából, és szénhidrogén-kutatási jelentősége is számottevő. Egyes vízföldtani részfeladatok megoldásához már tárgyévben is felhasználták a térképet és az adatbázist is. A kutatócsoport 3 tagja a tárgyévben is jelentős szerzői és koordináló feladatot végzett a Pannon-medence és azt körülölelő alpi–kárpáti–dinári hegység vonulatok térrénum térképeihez kapcsolódó cikksorozat, illetve monográfia elkészítése érdekében. A cikksorozat első része a *Geologica Carpathica* nemzetközi folyóiratban megjelent, a további 3 rész kiadása, lektorálás utáni korrigálása folyamatban van, egy összefoglaló monográfiával együtt.

OTKA-pályázatok támogatásával alapvető jellegű rétegtani, szedimentológiai, tektonikai kutatásokat végeztek a Bükk és a Darnó övezet, az Aggteleki–Rudabányai-hegység, valamint a Dunántúli-középhegység területén. Az Aggtelek-Rudabányai-hegységben a jura képződmények szerkezeti, metamorf kőzettani és fejlődéstörténeti átértékelése történt, melyeket szedimentológiai és mikropaleontológiai vizsgálatok is kísérték. A metamorf kőzettani és az eddig egyedülállóan sikeres mikropaleontológiai vizsgálatok során számos, eddig kérdéses besorolású szerkezeti egység helyzete tisztázódott. Az eredmények közlése nemzetközi folyóiratokban folyamatban van. A kutatócsoport több tagja egy új nemzetközi kutatási program (IGCP-572) keretében részt vett a paleozoikum és a mezozoikum határán lezajlott hatalmas globális természeti katasztrófa nyomainak kutatásában, továbbá brit és francia kutatókkal együtt újabb terepi kutatásokat végeztek.



A Radiometriai Laboratóriumban urán-soros kormeghatározásokat végeztek a KFKI ICP-MS Laboratóriumával folytatott együttműködés keretében. Folytatódtak az alfa-spektrometriai mérések transzuránok vizsgálatára környezetanalitikai és radiokémiai módszerfejlesztési, továbbá a gamma-spektroszkópiai mérések üledékföldtani céllal. Az urán-soros kormeghatározás egyik fő területe a paleorengések kutatásához kapcsolódó cseppkő-kormeghatározás. Ezen téma keretében folytatódott az együttműködés a Bolgár Földtani Intézettel, a témában közös publikáció is megjelent. A hazai vizsgálatokról is megjelent a MTA GGKI Szeizmológiai Obszervatórium munkatársaival közös publikáció.

A kutatócsoport munkatársának szeizmikus mérésekkel sikerült meghatározni a budapesti Molnár János-barlang egyetlen vízszint feletti termének helyzetét, majd a sikeres próbafúrás követően elkészült táró lehetővé tette a földtani kutatásokat, és e különleges természeti kincs megismerését a szélesebb közönség számára is.

Az ELTE Általános és Alkalmazott Földtani Tanszékének kutatóival közösen elemezték a geotermikus energiafelhasználás hazai lehetőségeit. Jelenleg a kitermelhető geotermikus energiának kevesebb, mint 10%-át aknázzák ki. Csak úgy lehet több hőt kinyerni, ha a lehűlt vizet visszasajtolják. A megfelelő technológia kidolgozása, tesztelése érdekében termelő-visszasajtoló kút-pár mintaprojekteket kell létrehozni, ami több milliárd forint beruházást igényel, de ez a geotermikus energiafelhasználás fejlesztéséhez elengedhetetlen. Siker esetén a DK-Alföldön, és a Kisalföld egy részén a lakótelepek fűtése megoldható lenne geotermikus energiával. Az ENGINE projekt (Enhanced Geothermal Innovative Network for Europe) keretében részt vettek a geotermikus energiakutatás során alkalmazott „legjobb módszerek” összeállításában (Best Practice Handbook).

A Kompas-2 műholdon sikerrel működött hullámkísérlet, a teljes egészében hazai gyártású SAS2-Kompasz ULF-VLF mérő- és jelfeldolgozó berendezés adatainak előzetes feldolgozását elvégezték, elemzését megkezdték. Elsőként mutatták ki, elméleti hullámterjedési leírásukkal értelmezték és publikálták a vezetett terjedés hatását természetes keltésű, plazmában terjedt impulzusok vizsgálatával műholdas fedélzeti adatsorokon. Közreműködtek a globális geokockázati jelenségek monitorozását célzó orosz (IKI) Chibis mikro-műhold (tervezett felbocsátás 2010. évben) tudományos és technológiai előkészítésében, a francia (CNES) DEMETER műhold regisztrátumainak tudományos feldolgozásában. Részt vettek az űr-időjárás jelenségeket is vizsgáló magyarországi, és magyar vezetéssel globálisan telepített keskeny- és szélessávú VLF mérőhálózat, ezen belül a magyar kiépítésű AWDANet hálózat továbbfejlesztésében és üzemeltetésében, és az e vizsgálatot támogató, automata esemény-detektáló és értékelő eljárások fejlesztésében.

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

A kutatócsoport munkatársai előadások és gyakorlatok tartásával részt vett az ELTE Földrajz és Földtudományi Intézetének oktatási tevékenységében és a Földtudományi Doktori Iskola munkájában. Az Intézet szinte valamennyi tanszékével együttműködtek különböző kutatási feladatok megoldásában, különösen szoros volt a kutatási együttműködés az Általános és Alkalmazott Földtani és a Geofizikai és Űrtudományi Tanszékekkel.

A kutatás, az oktatás és a továbbképzés területén is aktív együttműködés folyt a MOL Nyrt-vel. Igen szoros volt a munkakapcsolat a Magyar Állami Földtani Intézettel, elsősorban földtani térképszerkesztési feladatok tekintetében, az MTA Geokémiai Kutatóintézettel, az izótópgeokémiai és a metamorfózis vizsgálatok területén, a Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézettel elsősorban paleomágneses és obszervatóriumi méréseket illetően. A

radiometriai labor rendszeres munkakapcsolatban állt a BME Nukleáris Technikai Intézetével és az MTA Izotópkutató Intézetével. Konzorciális együttműködés keretében dolgoztak az MTA Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézettel, elsősorban a hullámterjedési, ELF-VLF vizsgálatok és az űr-időjárás kutatás területén. Több éves szakmai együttműködést folytatnak a FÖMI KGO-val (Penc).

MTA kétoldalú együttműködés keretében szerb és szlovák akadémiai és egyetemi intézetekkel folytatták a paleozoos és mezozoos kőzetek összehasonlító kutatását és a régiót felépítő terrénumok vizsgálatát. TÉT pályázat keretben osztrák, horvát és lengyel partnerekkel működtek együtt a rift-magmatizmus és az üledékképződés vizsgálatában, illetve paleomágneses kutatásokban. A hullámterjedés és ELF-VLF vizsgálatok terén szorosan együttműködtek francia, dél-afrikai, orosz, ukrán, indiai, új-zélandi, amerikai (USA) és brit kutatóhelyekkel. A műholdas távérzékelésben a US Department of Agriculture volt a legfontosabb partner intézmény.

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

ENGINE, (Enhanced Geothermal Innovative Network for Europe), Európai Unió VI. keretprogram (2006-2008). Részvétel a zárókonferencián, a szervező bizottság záróertekezetének megszervezése, publikációk befejezése.

Megnyert OTKA-pályázat (K72665, 2008-2012) „Földköpeny-konvekció dinamikájának és felszíni megnyilvánulásainak numerikus modellezése” címmel.

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

1. Ebner, F., Vozárová, A., Kovács, S., Kräutner, H.-G., Krstić, B., Szederkényi, T., Jamičić, D., Balen, D., Belak, M., Trajanova, M. 2008: Devonian—Carboniferous pre-flysch and flysch environments in the Circum Pannonian Region. – Geol. Carpath., 59, 2, p. 159-195, Bratislava.
2. Feist-Bruckhardt S, Götz A, Szulc J, Borkhataria R, Geluk M, Haas J, Hornung J, Jordan P, Kempf O, Michalik J, Nawrocki J, Reinhardt L, Ricken W, Röhling H, Ruffer T, Török Á, Zühlke R. (2008): Triassic. The geology of Central Europe, V2: Mesozoic and Cenozoic (Ed. McCann T). Geological Society, London, 750-821.
3. Kovács S, Haas J., Szabó I, Szabó I (2008) Permo-Mesozoic formations of the Recsk-Darnó Hill area: stratigraphy and structure of the pre-Tertiary basement of the Paleogene Recsk Orefield. In: Földessy J, Hartai É (Eds) Recsk and Láhóca geology of the Paleogene Ore Complex – Geosciences, Miskolc University Press, 33-56.
4. Szeidovitz Gy, Surányi G, Gribovszki K, Z. Bus Z, Leél-Össy Sz, Varga Zs. (2008): Estimation of an upper limit on prehistoric peak ground acceleration using the parameters of intact speleothems in Hungarian caves. Journal of Seismology Vol.12, Issue 1, p.:21-33
5. Lichtenberger J., Cs. Ferencz, Bodnár L., Hamar D., Steinbach P.(2008): Automatic Whistler Detector and Analyzer system: Automatic Whistler Detector. *J. Geophys. Res.*, 113, A12201, doi:10.1029/2008JA013467 ISSN 0921-8181
6. Herein M., Galsa A., Lenkey L. és Süle Bálint, 2008. Termikus földköpeny-konvekció kétdimenziós numerikus modellezése különböző geometriák esetén. Magyar Geofizika, 49/3: 111-123.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	7	Ebből kutató <sup>2</sup> :	7
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			37
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			36
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	6
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	9	idegen nyelven:	2
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	8,717	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	92
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			90
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	19	posztterek száma <sup>10</sup> :	12
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	3
		PhD-t:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			50
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			28 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	1	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	16,2 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,3 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,8 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,1 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## ELTE PEPTIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Hudecz Ferenc, a kémiai tudomány doktora  
1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/A., 1518 Budapest, Pf.32.  
Telefon: 372-2828, Fax: 372-2620  
e-mail: fhudecz@ludens.elte.hu, honlap: www.peptid.chem.elte.hu

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

Biológiailag aktív peptidek és peptid konjugátumok tervezése és szintézise, szerkezet-hatás vizsgálatok, terápiás alkalmazás és diagnosztikumok kifejlesztésének céljából. Olyan nagy specifitású peptid-antigének illetve gyógyszerhatóanyagok kifejlesztése, amelyek hozzájárulhatnak olyan sokakat érintő betegségek korai diagnózisához és gyógyításához, mint például a rák, TBC, Alzheimer-kór, reumatoid arthritis, herpesz fertőzés.

A kutatási tevékenység három témára koncentrálódik:

- Rákkemoterápiás kutatások: A gyógyászatban alkalmazott daganatgátló szerek konjugátumainak szintézise célfelismerő/célbajuttató oligo- és polipeptidek felhasználásával, amelyek elősegítik a gyógyszermolekulák tumorsejt specifitását, ezáltal csökkentve azok toxikus mellékhatásait. A konjugátumok *in vitro* és *in vivo* tumorelles hatásának vizsgálata és hatásmechanizmusuk feltérképezése.
- TBC kutatások: A *Mycobacterium tuberculosis* fertőzöttség korai kimutatása lineáris peptid epitópokra illetve ezek oligo- vagy polipeptid hordozóhoz kapcsolt konjugátumaira épülő teszt módszerrel, amelyek alkalmasak más fertőzések (pl. HIV) keresztreakcióinak kiszűrésére is. A TBC kezelésre bevált, illetve *in silico* módszerrel kiválasztott és hatékonyan bizonyult kismolekulák specifitásának növelése peptidkonjugátumok előállításával.
- Immunkémiai kutatások: A fent felsorolt betegségekhez kapcsolódó fehérjékből származó és módosított mesterséges peptid alapú „szuperantigén” szintézise diagnosztikai és szintetikus oltóanyag (vakcina) kifejlesztése céljából. A célfehérjék: mucin (MUC1, MUC2) glikoproteinek (rák), Herpes simplex vírus D glikoprotein, hősokk fehérjék, filaggrin (reumatoid arthritis), béta-amiloid (Alzheimer-kór).

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

A korábban előállított, oxim-kötést tartalmazó GnRH-III (Pyr-His-Trp-Ser-His-Asp-Trp-Lys-Pro-Gly-NH<sub>2</sub>) daunomicin konjugátumok *in vivo* tumorelles hatását C26 egér vastagbél tumort hordozó Balb/c egereken vizsgálták. *In vivo* toxicitási adatok alapján megállapították, hogy a konjugátum maximálisan tolerálható dózisa sokszorosa a szabad vegyület letális dózisának. A Dau-GnRH-III konjugátumok enzimstabilitásának, a hatóanyag felszabadulásának figyelembevételével új Dau-GnRH-III analóg konjugátumokat készítettek. (A kutatásban résztvevő összes kutatók száma/ ebből a kutatócsoport tagjai: 7/5)

Kemotaxison alapuló tumorterápia céljára új, tuftsin pentapeptid (TKPPR) tartalmú elágazó láncú peptid-hordozót és metotrexát konjugátumait alakították ki. A konjugátumok kemotaktikus aktivitása, sejtbejutásuk mértéke, valamint citosztatikus hatásuk alapján azonosították kemoattraktáns hatással rendelkező, tumorelles hatású vegyületeket. (7/5)

A *M. tuberculosis* fertőzöttség korai kimutatásához – a BCG vakcinatörzs lizátumából hiányzó – fehérje antigén (Rv2654) vizsgálata során T-sejt epitóp régiókat lokalizáltak

átlapoló dodekamer peptidek segítségével. A peptidek által kiváltott *in vitro* T-sejt választ ELISpot módszerrel határozták meg PPD pozitív látens fertőzöttek és aktív betegek PBMC sejtjein. A fehérje C-terminális régiója (61-81) a betegek 60%-ánál indukált specifikus T-sejt választ. BCG oltott donorok esetében egyik peptidnél sem észleltek *in vitro* aktivitást. (6/3)

Előállítottak új konjugátumokat, amelyekben jelenleg alkalmazott (INH, PAS) *M. tuberculosis* ellenes szerek kapcsolódnak oligopeptidekhez. Meghatározták, hogy az antituberkulotikum kémiai módosítása hogyan befolyásolja annak gátló aktivitását *M. tuberculosis* H<sub>37</sub>Rv és *M. kansasii* tenyészetben. Megállapították, hogy az INH konjugátumok mindegyike a szabad izoniaziddal (INH) közel azonos hatást mutat. Ugyanakkor a karboxil csoporton történő konjugálás hatására a PAS elveszti *in vitro* antituberkulotikus hatását. (6/3)

Előállítottak olyan új peptid-konjugátumokat, amelyek a  $\beta$ -amiloid-plakk specifikus ellenanyag epitopot (A $\beta$ (4-10), <sup>4</sup>FRHDSGY<sup>10</sup>), valamint különböző oligopeptid hordozót (oligotuftsin, MAP, SOC) tartalmaznak. A potenciális vakcina-konjugátumok oldatbeli szerkezetét CD spektroszkópiával, az ellenanyagkötődését pedig különböző ELISA módszerekkel jellemezték. Összefüggéseket állapítottak meg a térszerkezet és az antigénkötőképesség között, meghatározták az optimális ellenanyagkötődés konformációs feltételeit. (4/2)

A korábban előállított szérumban ELISA mérésekre alkalmas filaggrin peptideket tartalmazó „Multipin” peptidár segítségével azonosítottak egy-egy filaggrin 5-mer és 19-mer peptidet, amelyekben arginin helyett citrullint tartalmaznak. Megállapították, hogy reumatoid arthritis (RA) betegek szérummintáiban jelentősen magasabb az e vegyületeket felismerő IgG és IgM ellenanyag koncentráció, az egészséges szérumban szintjéhez képest. E citrullinált peptidek alkalmasak voltak CCP negatív és CCP pozitív betegek elkülönítésére is. (4/2)

A herpes simplex vírus D glikoproteinjéből származó epitópot, <sup>278</sup>LLEDPVGTVA<sup>287</sup> tartalmazó peptid-konjugátumok lebomlását vizsgálták humán szérumban, illetve patkánymáj lizoszóma-preparátumban. Az amid illetve tioéter-kötés jelenléte a konjugátumban jelentősen befolyásolta a degradáció mértékét és módját a lizozómában, míg az epitóp konjugációja hordozóhoz teljes védelmet biztosított a hígított humán szérumban történő lebomlással szemben. (6/4)

Sejtek szelektív „kiválogatására” alkalmas felszínnek létrehozása céljából ciklikus RGD peptidet konjugáltak tioéterkötéssel keresztül különböző töltésű és konformációval rendelkező elágazó láncú polipeptidekhez. A 10-30%-ban ciklopeptideket tartalmazó konjugátumokat sejttapasztási kísérletekben hasonlították össze. Megállapították, hogy a konjugátumok közül a polikationos jellegűek (AK, SAK) igen hatékonyak bizonyultak, míg világosan kiderült, hogy az amfoter variánsok (pl. EAK) nem használhatók erre a célra. (8/4)

Új módszert dolgoztak ki szintetikus peptidek cisztein tartalmának meghatározására. (4/4)

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok: ELTE Szerves Kémiai Tanszék, Immunológiai Tanszék, Biokémiai Tanszék; Matematikai Tanszék, Anatómiai, Sejt- és Fejlődésbiológiai Tanszék, Élettani és Neurobiológiai Tanszék; BME, Szerves Kémiai Tanszék; SE Biofizikai és Sugáregészségügyi Intézet, Immunológiai, Sejtbiológiai és Genetikai Intézet, 3.sz. Belgyógyászati Klinika, Központi Immunológiai Laboratórium; Pécsi Tudományegyetem Anatómiai Intézet, Immunológiai és Biotechnológiai Intézet; Országos Onkológiai Intézet; MTA Kémiai

Kutatóközpont; MTA KOKI; MTA SZBK Biokémiai Intézet, Enzimológiai Intézet; ORFI; Richter G. Vegyészeti Gyár Rt;

Nemzetközi kapcsolatok: Department of Experimental and Health Sciences, Pompeu Fabra University, Barcelona; Cell Biology, Purpan Medical School, Toulouse III University, France, Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, Konstanz University, Konstanz, Germany; Department of Medical Microbiology, University of Groningen, Groningen, The Netherlands; Department of Molecular Pathology, University of Palermo, Palermo; Institute of Food Science and Technology CNR, Avelino, Italy; Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana, Slovenia; Institute of Infectious Disease and Molecular Medicine, Faculty of Health Sciences, University of Cape Town, South Africa; Univ. of Helsinki, Helsinki, Finland  
Oktatás: PhD témavezetés (9 fő), V. éves diploma-témavezetés (5 fő), tudományos diákköri témavezetés dolgozattal (5 fő). Fő- és speciális kollégiumok, gyakorlatvezetés (biológus, vegyész, tanárszak), PhD előadássorozatok. Előadások tanár továbbképzés keretében. ERASMUS Oktatói és Hallgatói Mobilitás (Konstanz University, University of Helsinki).

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

NKTH (NKFP): A csoport részt vesz az ELTE eScience Regionális Egyetemi Tudásközpont programban (autoimmunbetegségek diagnosztikája, peptidkémiai kutatások), az NKTH (Jedlik) program keretében *M. tuberculosis* ellenes hatóanyagok kutatásában, valamint egy újonnan indult NKTH programban (szintetikus peptidek specifikus sejtadhéziós felületek, implantátumok bevonására) (közreműködők). OTKA: Négy programban (témavezető) folytatódott a kutatás (tumorelles hatóanyagok célbajuttatása, *M. tuberculosis* ellenes szerek, autoimmun betegségek diagnosztikája és terápiája témakörökben). Közülük egy program zárult le. Egy további OTKA-programban (jelfeldolgozás a sejtben) folytatódott a kutatás (közreműködő). Két ETT projekt, amely tumorelles hatóanyagok szelektivitásának növelését tűzte ki célul, eredményesen folytatódott. Két TÉT program keretében is folytatódik - a partnerek megelégedésére – az együttműködés: a Magyar-Francia (témavezető) és a Magyar-Délafrikai (témavezető) programokban.

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

1. Bánóczy Z, Alexa A, Farkas A, Friedrich P, Hudecz, F. Novel cell cell-penetrating calpain substrate. *Bioconj Chem.* 2008, 19: 1378-1381.
2. Horváti K, Bősze Sz, Hudecz F, Medzihradsky-Schweiger H. A simple method to monitoring the cysteine content in synthetic peptides. *J. Peptide Science* 2008, 14: 838-844
3. Manea M, Kalászi A, Mező G, Horváti K, Bodor A, Horváth A, Farkas Ö, Perczel A, Przybylski M, Hudecz F. Antibody recognition and conformational flexibility of a plaque-specific beta-amyloid epitope modulated by non-native peptide flanking regions. *J. Med. Chemistry* 2008, 51: 1150-1161.
4. Szabó R, Mező G, Pállinger É, Kovács P, Köhidai L, Bősze Sz, Hudecz F. In vitro cytotoxicity, chemotactic effect and cellular uptake of branched polypeptides with poly[L-Lys] backbone by J774 murine macrophage cell line. *Bioconj. Chem.* 2008, 19: 1078-1088.
5. Tugyi R, Mező G, Schlosser G, Fellingner E, Andreu D, Hudecz F. The effect of conjugation with polypeptide carrier on the enzymatic degradation of Herpes Simplex Virus glycoprotein D derived epitope peptide. *Bioconj. Chem.* 2008, 19: 1652 – 1659.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Átlagléttség <sup>1</sup> :	7	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			28
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			28
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	28
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	86,166	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	245
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			141
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	30	poszterek száma <sup>10</sup> :	16
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	9
			84
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			34 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	94,4 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			7
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	78,1 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,4 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## ELTE STATISZTIKUS ÉS BIOLÓGIAI FIZIKA KUTATÓCSOPORT

Vicsek Tamás, az MTA rendes tagja  
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1A  
Telefon: 372-2795, Fax: 372-2757  
e-mail: vicsek@angel.elte.hu

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

2008 évi feladatok egyfelől a korábban megkezdett kutatások eredményeinek fontos nemzetközi folyóiratokban való publikálása, és az esetenként hozzájuk társuló programcsomagok fejlesztése voltak. Egy további fontos feladat volt, hogy elkezdjük a megalapozását egy a korábbiaknál sokkal extenzívebb formában végzendő kutatásnak a kollektív mozgás témakörében. Az előzőleg elnyert pályázatok által lehetővé tett alkalmazások útján átmenetileg bővült létszámú kutatócsoport eredményes munkával a fenti célokat elérte.

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

Egy korábban publikált eljárásukból kiindulva kifejlesztettek egy újabb algoritmust, amely immár lehetővé teszi lokálisan nagyon sűrű részeket is tartalmazó hálózatok komplex belső struktúrájának feltárását a bennük fellelhető csoportosulások beazonosítása útján.

3 + 1 fő, 4MFt csoport, 1MFt külső támogatás

A kollektív mozgás alapmodelljét továbbfejlesztették, és így lehetővé tették a részecskék egyik viselkedés-típus (a gyorsulás) hatásának vizsgálatát a rendezett mozgásba való átmenet jellegére. Új fázisátalakulást találtak a gyorsulási tag súlyának függvényében. 2 + 1 fő, 1MFt csoport, 3.5MFt külső támogatás

Továbbfejlesztették a korábban elkészült mini-inkubátor vezérlőprogramját, így az immár a tápanyag-cserét is automatikusan vezérli. 1 + 2 fő, 1MFt csoport, 2MFt külső támogatás

Kifejlesztettek egy ultra könnyű GPS logger-t amelyet madarak hátára rögzítve követni tudták azok u.n. termikelését (felszálló légáramlatban való siklását). Az eredményeket kvantitatívan kiértékeltek, összevetették az emberi siklórepülés adataival, ill. az optimális repülési stratégiára vonatkozó elmélet predikcióival. 2+1 fő, 1.5 MFt

Új eljárást alkottak meg a statisztikus térelméleti perturbatív sorok részleges felösszegzésével nyert nem-perturbatív közelítések renormalizálhatóságának bizonyítására. Az eljárás teljes részletességgel hajtja végre a sor egyes tagjaihoz tartozó ellentagok alkotta sor felösszegzését. Első lépésben a Hartree–Fock-közelítésre, majd a kölcsönhatási állandóban négyzetes közelítés szintjén meghatározták a tetszőleges globális szimmetriával rendelkező Lorentz-skalár terek renormalizált 2PI funkcionálját. Az eljárás használható az egyensúlyi állapotegyenletnek, illetve az egyensúlytól távoli állapotok időfejlődésének meghatározására. (2 fő + 1 diplomamunkás)

Meghatározták az izospin kémiai potenciál hatását a véges sűrűségű és véges hőmérsékletű erősen kölcsönható anyag fázisdiagramjára. A számításokat a könnyű mezonok nonettjét és a konsztituens kvarkok szabadsági fokait tartalmazó modellben végezték el az optimalizált perturbációs számítás módszerét használva. (3 fő)

Kiszámították a királis szimmetriát helyreállító elsőrendű fázisátmenet végpontjának eltolódását a barionikus kémiai potenciál és a hőmérséklet alkotta síkban.



Meghatározták a pion-kondenzációra vezető átmenet alsó kritikus hőmérsékletét az izotópikus kémiai potenciál függvényében.

#### *Társadalmi hasznosulás:*

A hálózatkutatói eredmények társadalmi hasznosítása folytatódott. A csoport által kifejlesztett szoftvert sok százan letöltötték és használják szerte a világban. A hálózatokkal foglalkozó kutatócsoport tagok együttműködnek egy kifejezetten a hálózati módszerek alkalmazására frissen létrejött piaci tanácsadó céggel (Maven7), amely szervezetfejlesztési és egyéb feladatokat végez nagy cégeknél, az alkalmazottak kapcsolati hálójának analízise segítségével. Egy sikeres szervezetfejlesztés eredményeképpen a cégek hatékonyabban tudnak működni, és a kollégák kapcsolata, közérzete, informáltságának szintje is sokat javul.

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

A kutatócsoport szoros együttműködésben van több hazai és külföldi kutatóhellyel. Az alábbiakban csak azokat sorolom fel, amelyek keretében publikáció is született, ill. készülöben van.

#### *Hazai együttműködések:*

Sejtbiológiai vonatkozású kutatások terén együttműködnek Dr. Madarász Emília csoportjával (MTA KOKI),

#### *Nemzetközi együttműködések:*

Prof. Barabási Albert-László csoportjával (University of Notre Dame, USA). Háromoldalú kutatási együttműködését folytattak a Graz-i Karl Franzens Egyetem és a zágrábi Rudjer Boskovic Intézet, valamint a Zágrábi Egyetem kutatóival.

A nemzetközi kapcsolatokhoz tartozik, hogy a csoport vezetője szerkesztő bizottsági tag a *Fractals* és a *Physica A* című folyóiratoknál.

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

Az elnyert pályázatok közül 2008-ban kiemelkedik a csoport vezetője által elnyert FP7 ERC Advanced Investigators Grant (1,28 M Euro), amelyik a kollektív viselkedés számos aspektusának és törvényszerűségeinek kutatását az eddigiéknél egy nagyságrenddel nagyobb forrással fogja támogatni.

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

1. Zs. Ákos, M. Nagy, T. Vicsek: Comparing bird and human soaring strategies, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA.*, 105, No. 11 (2008) 4139-4143
2. V. Szilávik, B. Szabó, T. Vicsek, J. Barabás, S. Bogdán, V. Gresz, G. Varga, B. O'Connell and J. Vág, Differentiation of Primary Human Submandibular Gland Cells Cultured on Basement Membrane Extract, *Tissue Engineering Part A* 14 (11): (2008) 1915-1926
3. G. Palla, I. Farkas, P. Pollner, I. Derényi, and T. Vicsek, Fundamental statistical features and self-similar properties of tagged networks, *New J. Phys.* 10 (2008) 123026

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	8	Ebből kutató <sup>2</sup> :	8
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	2
			5
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			17
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			11
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	0
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	45,556	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	243
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			228
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	13	poszterek száma <sup>10</sup> :	5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	3
			98
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			31 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			8
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		15,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	40,8 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## ME ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Roósz András, MTA levelező tagja

3515 Miskolc-Egyetemváros, Anyagtudományi Intézet

Telefon: (46) 565-111/15-43, Fax: (46) 565-214

e-mail: femroosz@gold.uni-miskolc.hu, honlap: www.matsci.uni-miskolc.hu

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

Réz alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása és fejlesztése  
Az olvadáskéramlások hatása az eutektikum kristályosodására  
Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre

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

#### *Réz alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása és fejlesztése*

Kutatásaikhoz Cu-Zr-Al, Cu-Zr-Ag, Cu-Zr-Ni, Cu-Hf-Ti és Cu-Hf-Al háromalkotós ötvözeteket állítottak elő, majd ezen előötvözetek felhasználásával különböző előállítási módszerekkel, úgymint öntéssel, őrléssel, illetve lézeres felületkezeléssel amorf szerkezetű anyagokat hoztak létre.

Az amorf képződési hajlam az eutektikus közelben a legnagyobb, ezért az irodalomban található ternér eutektikus pontokhoz közelítették a próbák összetételét. A mesterötvözeteket ívfényes olvasztással nagy tisztaságú argon védőatmoszférában gyártották. Az amorf anyagok egyik jellemző termikus paramétere az ún. supercooled liquid tartomány, melyet mindegyik ötvözet esetén meghatároztak. Megállapították, hogy az oxigéntartalom maximum 100 ppm lehet, hogy amorf szerkezetet tudjanak létrehozni öntéssel.

A Cu-Zr-Ag, Cu-Zr-Al és Cu-Zr-Ni ötvözetcsalád esetén a  $\text{Cu}_{52}\text{Zr}_{48}$  összetételből indultak ki. A  $(\text{Cu}_{58}\text{Zr}_{42})_{100-x}\text{Ag}_x$  ( $x = 0\div 22,5$  at%) rendszerben öntéskor az ék próba vastagabb részein ( $>1$  mm) már részben, illetve teljesen kristályos szerkezet alakult ki, s ennek pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálata alapján alátámasztották, hogy valóban létezik egy monotektikus rendszer ebben az ötvözetcsaládban. Megállapították továbbá, hogy a maximális amorf réteg vastagsága függ a mérési technikától. A röntgendiffrakcióval mért maximális amorf réteg vastagsága mindig nagyobb, mint a pásztázó elektronmikroszkóppal mérté.

A  $(\text{Cu}_{58}\text{Zr}_{42})_{100-x}\text{Ag}_x$  ( $x = 0\div 14,8$  at%) és  $(\text{Cu}_{58}\text{Zr}_{42})_{100-x}\text{Al}_x$  ( $x = 0\div 14,8$  at%), ötvözetcsaládban a kristályos mesterötvözeteket aprították, majd golyós malomban őrlték, hogy amorf porokat állítsanak elő. Ahhoz, hogy golyós malomban amorf porokat állítsanak elő, többféle paraméter együttes összehangolása szükséges. A tégely- anyaga és nagysága, a golyók- anyaga és mennyisége, a golyó-bemért por tömegaránya, a bemért por szemcse nagysága, esetleges védőgáz használata, az őrlés sebessége és ideje befolyásolhatják az amorf por létrehozását. Az alapötvözetben ( $\text{Cu}_{52}\text{Zr}_{48}$ ) előkísérleteket végeztek ezen paraméterek megállapításához, ami esetükben a 250 ml-es, argon védőgázzal feltöltött saválló acélból készült őrlő tégelynél a következő: a golyó-bemért por arány: 20:1, a bemért por szemcsemérete  $< 320$   $\mu\text{m}$ , az őrlés sebesség 200 rpm, a saválló golyók 5mm-esek. Ezzel a beállítással már 120 perces őrléssel  $>97\%$  amorf hányaddal rendelkező por állítható elő.

Cu-Zr-Ni ötvözetű réteget lézersugaras felületkezeléssel hozták létre az eredetileg nem amorf,  $\text{Cu}_{52}\text{Zr}_{48}$  összetételű alapötvözetben. A kialakított réteg amorf-, esetleg nanoszerkezetű. A lézersugaras felületkezelési technikák (LST) közül lézersugaras bevonással, lézersugaras ötvözéssel és lézersugaras átolvasztással hoztak létre nanoszerkezetű felületi réteget. A lézersugaras bevonás esetén a  $\text{Cu}_{58}\text{Zr}_{42}$  mesterötvözetben galvanizálással  $\sim 20$   $\mu\text{m}$  vastagságú Ni réteget hoztak létre, majd impulzus üzemmódú Nd:YAG lézersugaras átolvasztás során (a

lézer teljesítménye 2 kW a kezelési idő 20÷100 ms) hoztak létre ~ 300 μm vastag nanoszerkezetű felületi réteget. A lézersugaras ötvözés során lézersugár segítségével Ni<sub>3</sub>Al port vittek be a Cu<sub>58</sub>Zr<sub>42</sub> mesterötvözetbe. A Cu<sub>48</sub>Zr<sub>47</sub>Ni<sub>5</sub> mesterötvözetet impulzus üzemmódú Nd:YAG lézersugárral átolvasztották. A 2 kW és 20 ms kezelési idő alkalmazása esetén a felületi réteg részlegesen amorf volt.

A Cu-Hf-Ti ötvözetrendszeren belül három összetétel amorf képződési képességét vizsgálták. A három különböző összetételű ötvözet (Cu<sub>57.5</sub>Hf<sub>27.5</sub>Ti<sub>15</sub>, Cu<sub>57.5</sub>Hf<sub>25</sub>Ti<sub>17.5</sub> és Cu<sub>60</sub>Hf<sub>27.5</sub>Ti<sub>12.5</sub>) kristályosodáskor keletkezett fázisokat röntgendiffrakcióval azonosították. A darabok öntését követő elemzések alapján ~ 1.5 mm vastagságú amorf darabot sikerült előállítaniuk. E vastagság felett már megfigyelhető az először nagyon finom, majd egyre durvább dendrites szerkezet.

A Cu-Hf-Al ötvözetek közül a Cu<sub>49</sub>Hf<sub>42</sub>Al<sub>9</sub>, Cu<sub>50</sub>Hf<sub>42.5</sub>Al<sub>7.5</sub>, a Cu<sub>50</sub>Hf<sub>45</sub>Al<sub>5</sub>, a Cu<sub>46</sub>Hf<sub>45</sub>Al<sub>9</sub> ötvözet üvegesedési képességét vizsgálták. Az első három ötvözetből készült ékpróbák esetében közel 1 mm, esetenként 1,5 mm vastagságban alakult ki amorf szerkezet (a Cu<sub>49</sub>Hf<sub>42</sub>Al<sub>9</sub> ötvözetnél egyetlen ék esetében 3,5 mm vastagságban lett amorf). A Cu<sub>46</sub>Hf<sub>45</sub>Al<sub>9</sub> ötvözet esetében 0.5 mm vastagságig találtak amorf állapotot. A Cu<sub>49</sub>Hf<sub>42</sub>Al<sub>9</sub> ötvözetből öntött rúd próbatesteknél 3mm vastagságban találtak amorf szerkezetet, a Cu<sub>50</sub>Hf<sub>42.5</sub>Al<sub>7.5</sub> és Cu<sub>50</sub>Hf<sub>45</sub>Al<sub>5</sub>, Cu<sub>46</sub>Hf<sub>45</sub>Al<sub>9</sub> ötvözet esetében a rúdpróbáknál nem alakult ki amorf szerkezet.

Társadalmi vonatkozásban különös jelentőségű, hogy mindannyian nők. Létrejött a kutatási infrastruktúra, kialakultak a hazai és nemzetközi kutatási kapcsolatok.

*Az MTA támogatás 100%-át fordították a fenti kutatás finanszírozására.*

*Az olvadékáramlások hatása az eutektikum kristályosodására*

Al-Al<sub>3</sub>Ni eutektikus összetételű ötvözetet irányítottan kristályosították állandó 8K/mm-es hőmérséklet-gradienssel és 0,1mm/s kristályosítási sebességgel. A kristályosítás közben az olvadékot megkeverték forgó elektromágneses térrel. A kísérleteket elvégezték 0, 10, 50, és 150mT mágneses tér esetén. Végeztek kísérleteket, ahol a mágneses teret kristályosítás közben be illetve kikapcsolták.

Az így készített darabokat fénymikroszkóp, sztereomikroszkóp, scanning elektronmikroszkóp és képelemző szoftver segítségével vizsgálták.

Al-Si eutektikumot 8K/mm-es hőmérséklet-gradienssel és 0,1mm/s kristályosítási sebességgel, 0 és 10mT mágneses térben kristályosították. Az elkészült darabokat fénymikroszkóp, sztereomikroszkóp, scanning elektronmikroszkóp és képelemző szoftver segítségével vizsgálták.

*A KvVM támogatás 100%-át fordították a fenti kutatás finanszírozására.*

*Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre*

Az év folyamán tovább folytatták a kristályosítási kísérleteket. Egyirányú kristályosításokat végeztek forgó mágneses térben Al<sub>10.5</sub>Fe és Al<sub>7</sub>Si<sub>1</sub>Fe, Al<sub>6</sub>Si<sub>4</sub>Cu ötvözeteken. Az úrbeli végzett kristályosítási kísérletekhez szorosan kapcsolódva kifejlesztettek egy, az úrbeli kristályosítások energia és időigényét csökkentő kristályosítási technikát. Ez azt jelenti, hogy az eljárás segítségével egy-egy mintán belül elemezni lehet többféle kristályosítási paraméter hatását, illetve a paraméterek változásának szerepét. E módszer úrben történő alkalmazásával a kristályosítási kísérleteknél idő- és költségmegtakarítás érhető el.

Készítettek olyan mintákat, melyek kristályosítása során egy- mintán belül változtatták a mágneses tér intenzitását, illetve a minta egyik részét mágneses keverés nélkül, a másik részét mágneses térben kristályosították. Ez a módszer lehetőséget teremtett arra is, hogy a minták kristályosodott makro- és mikroszerkezetében elemezni tudják a forgó mágneses tér be és kikapcsolása keltette átmeneti jelenségeket.

A kvantitatív szövetvizsgálatok során a kristályosodott dendrites mikroszerkezet geometriai adatai közül a szekunder dendritág távolság mérését végezték a minták hosszcsiszolatain és összehasonlítottuk a minták szélén és közepén mért értékeket. Az olvadékáramlás hatására fellépő ötvözőfém koncentráció-változásnak a szekunder dendritág távolság értékeiben jelentkező eltéréseit mérésekkel igazolták.

További méréseket végeztek a minták hosszcsiszolati szövetképein a „Karácsonyfa” alakú makrodúsulás jellemző paramétereinek (dúsult ágak külső átmérője, szöge, a minták tengelyében a dúsult mag átmérője, dúsult ágak távolsága) meghatározására.

A kristályosítás közben létrejövő szövetszerkezet kialakulásáért a frontsebességen és a hőmérséklet gradiensen kívül az olvadékáramlás is felelős. Ennek modellezésére elkészítettek egy szobahőmérsékletű Ga-In ötvözetet alkalmazó MHD (magnetohidrodinamikus) keverő berendezést és az olvadékáramlás sebességének meghatározására szolgáló berendezést. A mérőszondában különféle átmérőjű és fal érdességgel rendelkező tégelyekben MHD keverővel megforgatva az olvadt ötvözetet, és a sugár mentén mérve (kompenzációs nyomás mérésével) az olvadékban létrejövő nyomást, kiszámítható az olvadékoszlop szögsebessége, illetve fordulatszám.

*A PRODEX támogatás 100 %-át fordították a fenti kutatás finanszírozására.*

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

Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológia Intézet (BAY-ATI); Bay Zoltán Nanotechnológia Kutatóintézet (BAY-NANO); Schmelzmetal Kft.; G. Müller, CGL, Erlangen; Camel, CEA, Grenoble; H. Jones, DEM, Sheffield; Dr. Y. Fautrelle, MADYLAM, Grenoble; L. Ratke, DLR, Cologne; G. Zimmermann, ACCESS e.V., Aachen

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

MICAST III Hungary, Európai Űrügynökség PRODEX program, 2+2 éves projekt

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

1. G. Buza, V. Jano, M. Sveda, O. Verezub, Z. Kalazi, G. Kaptay and A. Roosz: On the possible mechanisms of porosity formation during laser melt injection (LMI) technology *Materials Science Forum Vol. 589 (2008) pp 79-84*
2. Benke M, Tranta F, Barkoczy P, et al.: Effects of heat-flux features on the differential scanning calorimetry curve of a thermoelastic martensitic transformation *Materials Science and Engineering A Vol. 481 (2008) 522-525*
3. E. Nagy-V. Mertinger-F. Tranta- J. Sóllyom: Strain induced martensitic transformation in textured austenitic stainless steels *Materials Science and Engineering A Vol. 481 (2008) 718-722*
4. E. Nagy, D. Janovszky, M. Sveda, K. Tomolya, L.K. Varga, J. Solyom, A. Roosz: Investigation of crystallization in an amorphous Cu-based alloy by X-ray *Materials Science Forum Vol. 589 (2008) pp 131-136*
5. G. Karacs and A. Roósz: A Two-Dimensional Cellular Automaton Simulation for the Description of the Austenitization in Hypoeutectoid and Eutectoid Fe-C Steels, *Materials Science Forum Vol. 589 (2008) pp 317-322*

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-ME Anyagtudományi Kutatócsoport

Átlagléttség <sup>1</sup> :	8	Ebből kutató <sup>2</sup> :	7
PhD, kandidátus:	7	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	1
		rendes tag:	0
			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			7
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			7
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	18
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	13	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	52
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			44
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	9	posztterek száma <sup>10</sup> :	26
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	0
			219
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			26 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	13 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## **ME MŰSZAKI FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT**

Lakatos István, az MTA levelező tagja  
3515 Miskolc-Egyetemváros, Pf. 2.  
Telefon: (46) 565-255, Fax: (46) 363-349  
e-mail: lakatos@akki.hu,

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

A Műszaki Földtudományi Kutatócsoport elsődleges feladata olyan termelési és ehhez kapcsolódó geotechnikai eljárások elméleti megalapozása, amely lehetővé teszi a természeti erőforrásokkal történő nagy hatásfokú, gazdaságos és környezetbarát gazdálkodást, az importfüggőség csökkentését és az ellátottság nemzetgazdaság szintű javítását. Metodikai szempontból a tervezett kutatási projektek egységet képeznek a különböző tudományágak, így a geofizika, a bányászati tudományok, a kémiai tudományok, környezettudomány stb. hozzájárulása mellett. A Kutatócsoport K+F tevékenységének súlypontját az alábbiak képezték:

- természeti erőforrások feltárását, támogatását célzó geofizikai kutatások;
- geotechnikai módszerek és integrált technológiák fejlesztése;
- konvencionális és nem konvencionális szénhidrogének hatékony kitermelését biztosító eljárások megalapozó kutatások.

A kutatás-fejlesztés súlypontját 2008-ban a konvencionális geofizikai, geotechnikai és termelési eljárások „state-of-the-art” kritikai értékelése, az energiahordozók globális és hazai prognózisának pontosítása, valamint olyan új technológiák megalapozása képezte, amelyek lehetővé teszik a megkutatott földtani vagyon kitermelési hatékonyságának növelését.

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

A tárgyévben tovább folytatódott a 21. század globális és hazai energiaigényének felmérése és az ellátottság pontosítása, aminek középpontjában a fosszilis energiahordozók álltak. A konvencionális szénhidrogénekre vonatkozó előrejelzések ezen energiahordozók drasztikus felértékelődését vetítették előre és bizonyították az intenzív termelési, elsősorban kémiai technológiák széleskörű alkalmazásának szükségességét, továbbá a nem konvencionális szénhidrogének hasznosításának megkezdését, fokozását. A kutatócsoport részletesen foglalkozott a megújuló és alternatív energiaforrásoknak a globális energiaigények kielégítésében játszott szerepével, valamint áttekintette a szénféleségek jelenlegi és jövőbeli szerepét is. A tanulmányok rávilágítottak arra a tényre, hogy a fosszilis energiahordozók még több évtizedig meghatározói maradnak az egyre növekvő energiaigények kielégítésének, és átértékelésre szorulnak a megújuló energiaforrások iránt táplált túlzott remények. A hazai és nemzetközi publikációkban a szerzők felhívták a figyelmet Magyarország egyre növekvő energiafüggésére, és ezen belül a hazai szénhidrogénkészletek növelésének, a megkutatott vagyon jelenleginél hatékonyabb kitermelésének fontosságára. Az adott tárgyban született publikációk érdemi hozzájárulást jelentenek az MTA Energia Stratégiai Bizottságának munkájához és az ország közép- és hosszú távú energiastratégiájának kidolgozásához. A témán 3 kutató dolgozott, közülük kettő a kutatócsoport tagja. A téma művelésére 400 óra (2,4 MFt) ráfordítást igényelt.

Két évtizedet átfogó laboratóriumi és mezőbeli tapasztalatok alapján olyan új elvi alapokon nyugvó, kolloidkémiai törvényszerűségeket felhasználó rétegkezelési módszer kidolgozására

került sor, amely alkalmas a földgáz-mezőkben és földalatti tárolókban üzemelő kutakban a víztermelés korlátozására, megszüntetésére. A reológiai és áramlástan vizsgálatok alapján az ultrakönnnyű és közepes viszkozitású szerves külső fázisú mikroemulziók tekinthetők olyan közegnek, amely a pórusos rendszerben vízzel érintkezve kiemelkedő gátképző hatást eredményeznek, és egyúttal lehetővé teszik a mélyen penetrált rétegkezelési technológia telep körülmények közötti alkalmazását. A szabadalom szintű módszer legfontosabb jellemzője, a metastabilis állapotú rendszer víz által iniciált átalakulása stabilis, gátképző rendszerré. A MOL Nyrt Upstream divízió által is támogatott projekt keretében meghatározásra került azon rezervoármechanikai, telepszerkezeti és termeléstörténeti adatok köre, amelyek alapján a kezelendő gáztermelő kutak kiválaszthatók. Virtuális kutak jellemzőinek felhasználásával demonstratív rétegkezelési technológia, felszíni infrastruktúra és monitoring rendszer került összeállításra. Ennek célja olyan pilot, mezőbeli, konkrét gáztermelő kút kezelésének előkészítése, amely igazolhatja a laboratóriumi alap- és alkalmazott kutatások eredményét, az irodalmi adatok szerint is unikális gátképzési technológia alkalmazhatóságát. A kidolgozott eljárás ipari alkalmazása jelentős termelési költségmegtakarítást, többlet gáztermelést eredményezhet a hazai szénhidrogéniparban és kisebb víztermelésen keresztül csökkentheti a gáztermelés környezetkárosító hatását. A K+F témát 4 kutató művelte, akikből 2 a kutatócsoport tagja. A téma művelése 600 óra (3,6 Mft) ráfordítást igényelt.

A kutatócsoport tagjai közreműködtek a hazai CO<sub>2</sub> befogásának és geológiai formációkba történő elhelyezésének felmérésében és értékelésében. A vizsgálatok konkrét forráshoz (Mátrai Erőmű) és tárolási formációkhoz, (felhagyott vagy aktív) kőolaj- és földgáztelepekhez kötődtek. A felmérés a tárolt CO<sub>2</sub> formáját, a tárolási kapacitást és a befogás, tárolás költségeinek nemzetközi adatok alapján történő becslését állította a középpontba. A vizsgálat, konvergálva a külföldi pilot jellegű műveletekhez, arra az eredményre vezetett, hogy a számításba vehető geológiai formációk véges tárolókapacitással rendelkeznek. A befogás-szállítás-elhelyezés-monitorozás költségei csak a finanszírozás megosztásával, állami vagy nemzetközi támogatással biztosíthatók, és a költségeknek az elektromos áram fogyasztói árban történő átruházásának társadalmi feltételei jelenleg nem adottak. A kutatási téma mind hazai, mind globális értelemben, az érdeklődés középpontjában áll és közvetlenül kapcsolatban van a közép- és hosszú távú energiastratégia kidolgozásával, az új erőművek telepítését megalapozó döntések meghozatalával. A témában 4 kutató működött közre, közülük három a kutatócsoport tagja. A téma művelése 300 óra (1,8 Mft) ráfordítást igényelt.

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

Az Olajkémi Kutatóintézettel, Orosz Tudományos Akadémiai Szibériai Szekció, Tomszk, Oroszország „Intelligens kémiai rendszerekre alapozott kőolajtermelési módszerek alap és alkalmazott kutatása” című témában az MTA-RAS együttműködés keretében.

A Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar tanszékeivel a földtudomány és a bányászati tudományok területén valamennyi kutatott témakörben.

A MOL Nyrt. Upstream divízióval a kihazatali hatásfok növelését célzó elárasztási és rétegkezelési technológiák kidolgozása.

A Falcon Co. magyarországi leányvállalatával a TXM Kft-vel a nem konvencionális, nagy mélységben elhelyezkedő földgáz előfordulás (Basin Concentrated Gas Accumulation) áramlástan jelenségeinek, köztszerkezeti és felületkémi vizsgálata.



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

„Metastabilis mikroemulziók alkalmazására épülő rétegkezelési eljárások elméleti megalapozása”, OTKA 48715 témában témavezetőként.

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

1. Lakatos, I., Lakatosné-Szabó, J.: A nem konvencionális szénhidrogének jelentősége a 21. században, Globális kitekintés – hazai perspektívák, p. 115-146 in Szentgyörgyi, ZS. (editor): Tanulmányok a magyarországi energetikáról, MTA, Budapest, (2008) ISBN 978-963-508-573-6
2. Lakatos, I., Lakatos-Szabó, J.: Global Oil Demand and Role of Chemical EOR Methods in the 21<sup>st</sup> Century, International Journal of Oil, Gas and Coal Technology, 1(1/2): 46-64 (2008)
3. Lakatos, I., Lakatos-Szabó, J., Bódi, T.: New Alternatives of Water Shutoff Treatments: Application of Water Sensitive Metastable Systems, Society of Petroleum Engineers Papers 112403 (2008), presented at the SPE International Symposium and Exhibition on Formation Damage Control, Lafayette, Louisiana, USA, 13-15 February 2008
4. Kovács, F., Lakatos I.: Globális kőolajkészletek és ellátottság a XXI. században, Miskolci Egyetem Közleményei, Bányászat és Geotechnika, A sorozat, Bányászat, 75: 65-101 (2008)
5. Dobróka, M., Völgyesi, L.: Inversion Reconstruction of Gravity Potential Based on Gravity Gradients, Mathematical Geoscience, 44: 299-311

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	4	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			23
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			23
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	1
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	4	idegen nyelven:	2
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	0	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			0
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	7	posztterek száma <sup>10</sup> :	5
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	5
			1200
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			13 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	1	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	27 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			6
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	25 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## MTM PALEONTOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

Vörös Attila, az MTA levelező tagja  
1088 Budapest VIII., Ludovika tér 2. 1431 Budapest, Pf. 137;  
Telefon: 210-1075, 338-3905; Fax: 338-2728  
e-mail: voros@nhmus.hu

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

A 2003-ban indult kutatócsoport hosszú távú feladata alap kutatások végzése a bioszféra nagy változásainak elemzése céljából. A beszámolási év fő feladatai voltak:

- Alsó-jura Brachiopoda fauna monografikus feldolgozása.
- Triász és jura Radiolaria vizsgálatok folytatása.
- Paleobiológiai Adatbázis (triász és jura Ostracoda) fejlesztése.
- Archosauria leletek (Iharkút) összehasonlító anatómiai, funkcionális morfológiai vizsgálata, filogenetikai vizsgálatok.
- A Kokadi-láp késő-negyedidőszaki üledékszelvényeinek komplex paleoökológiai feldolgozása.
- Paleogenetikai vizsgálatok az erdélyi és magyar üledékszelvények fosszilis *Picea abies* pollenein.

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

Kritikai áttekintést adtak a triász időskála kalibrációjának alapját jelentő radiometrikus (U-Pb és 40Ar/39Ar) koradatokról, rámutatva a jelenleg használatban lévő geológiai időskála gyengeségeire és pontosításának lehetőségeire. Felismerték, hogy a késő triász, ezen belül különösen a nóri időtartama a korábban becsülnél lényegesen hosszabb, ami a triász végi kihalást megelőző intervallumra jellemző evolúciós ráták újraszámolását kívánja meg.

Az észak-magyarországi jura képződmények (Telekesvölgyi komplexum, Telekesoldali komplexum és Mónosbéli komplexum) biosztratigráfiai vizsgálatai alapján új szerkezeti és szedimentológiai modelleket dolgoztak ki.

Elvégezték a Vardar zóna különböző lelőhelyeinek triász radiolária vizsgálatát és ennek segítségével értelmezték a Neotethys riftesedési folyamatát.

Folytatták a törökországi (Mersin Mélange) felső-triász radiolária fauna taxonómiai és paleoökológiai feldolgozását.

Elvégezték a Rudabányai-hg. anisusi ammonoidea faunájának taxonómiai, rétegtani és ősföldrajzi újraértékelését. A 17 fajba sorolható 400 ammonoidea példány alapján a vizsgált rétegsor az anisusi Trinodosus Zóna legfelső, Camunum Szubzónájába sorolható. A sima héjú ammonoideák nagyfokú dominanciája az erősen díszített Ceratitidaekkel szemben többszáz m-es egykori vízmélységre utal. A dinári-hellén faunákkal kimutatott nagyfokú paleobiogeográfiai hasonlóság arra utal, hogy ezek a faunák a Tethys óceán Mellétei-Vardar ágának selfperemei mentén éltek.

A mezozoós ostracoda faunák fejlődése témakörében elkészült a triász és jura ostracoda fauna áttekintő adatbázisa.

A triász végi kihalás és környezetváltozás oknyomozó kutatásában palinológiai vizsgálatok segítségével igazolták a csóvári szelvényben a tengeri prasynophyta algák és a páfrányspórák kiugró gyakoriságát a triász/jura határon. A korábban dokumentált szénizotóp-kielengéssel

egyidőben bekövetkezett változások alapján bizonyították, hogy a tengeri és szárazföldi növényvilágot egyidejű krízis érintette. Ezzel egyidős mecseki fúrasi rétegsorok vizsgálatával viszont a triász/jura határ környékén ciklikus vegetációváltozásokat tudtak kimutatni.

Befejeződött a bakonyi pliensbachi brachiopoda fauna monografikus leírása (38 genus, 95 faj; közülük 5 új genus és 7 új faj).

Kimutatták, hogy az iharkúti lelőhelyen (Bakony) előkerült Theropoda dinoszaurusz faunában legalább három eltérő csoport volt jelen, melyből az Abelisauroidea egyértelműen Gondwana eredetű és egyben a csoport legkorábbi előfordulása Európában. A primitív Tetanuraek jelenléte tovább erősíti azt a korábbi elképzelést, miszerint a Bakonyi terület refúgiumként működött, ahol a fajok jelentős részét primitív és endemikus tulajdonságok jellemezték.

Az Archosauriák funkcionális morfológiai vizsgálata során elvégezték az Európában található primitív (késő-triász–kora-jura) pteroszauruszok táplálkozással kapcsolatos anatómiai jegyeinek (fogazat, fogkopás, koponya és alsó állkapocs morfológia, rekonstruált adductor izomzat) vizsgálatát. Ezek alapján nyomon követték a fogazat és egyéb jegyek változását, aminek alapján kimutatták, hogy a korai formák még döntően rovarevők voltak, a fejlettebb csoportok (kora-jurától) viszont már dominánsan halakat fogyasztottak.

Elvégezték a Kárpát-medencéből ismert késő-neogén emlősfauna közösségek ökológiai paramétereinek vizsgálatát. A 64 késő-pleiocén, pleisztocén és holocén lelőhely 156 rétegének emlősfauna adatai alapján rekonstruálták a terület éghajlati és vegetációs változásait. Az ökológiai jellegek (ökotípusok) eloszlását az adott faunán belül (ökológiai változók) alapvetően a klíma és a növényzet határozza meg. A vizsgált időintervallumban tíz ökológiai egységet tudtak megkülönböztetni és értelmezni a Kárpát-medence területén.

Elvégezték két retyezáti gleccsertő radiokarbon datálását és a legalacsonyabb tengerszint feletti magasságban lévő tó nagyfelbontású pollen és diatóma analízisét, valamint a kelet-magyarországi Kokadi-láp üledékeinek mintavételezését.

Teljeskörűen katalogizálták a Magyar Természettudományi Múzeumban őrzött gerinctelen és gerinces paleontológiai típuspéldányokat.

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

A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet játszanak a hazai őslénytani tudományos közéletben, mint a Magyarhoni Földtani Társulat Őslénytani-Rétegtani Szakosztályának elnöke és vezetőségi tagja. A kutatócsoport vezetője az MTA Földtudományok Osztálya elnökhelyettese, a Magyarhoni Földtani Társulat társelnöke, valamint a Nemzetközi Triász Rétegtani Albizottság szavazati jogú tagja. A kutatócsoport egy tagja az OTKA Földtudomány I. Zsűri elnöke, hazai és nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja, valamint a Nemzetközi Jura Rétegtani Albizottság elnöke.

A kutatócsoport tagjai speciális kollégium és doktori kurzus tartásával vállalnak részt az ELTE TTK, valamint a kolozsvári Babes-Bolyai Egyetem geológus képzésében.

A kutatómunka során aktív nemzetközi együttműködés folyik amerikai, angol, francia, holland, német, kanadai és argentin kutatókkal.

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

OTKA K72633: „A mezozoós geológiai időskála egyes részeinek pontosabb kalibrálása és alkalmazása bioszféra-történeti kutatásokban”

OTKA F048341: „Magyarországi triász és jura radiolária közösségek taxonómiai és biosztratigráfiai vizsgálata, valamint alkalmazása globális paleo-oceanográfiai modellezésben”

OTKA PD73021: „A magyarországi késő-kréta Archosauria fauna vizsgálata”

OTKA PD73234: „A holocén klíma- és környezet nagyfelbontású, multi-proxi rekonstrukciója a Kárpáti-régióban: a vegetáció válaszreakciója a koraholocén felmelegedési hullámokra magashegységi és alföldi környezetben”

TÉT magyar-argentin bilaterális együttműködés.

MERG-CT-2006-041088: Marie Curie Reintegration Grant.

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

1. Kovács S, Haas J, Szabó G, Gulácsi Z, Pelikán P, Bagoly-Árgyelán G, Józsa S, Görög Á, Ozsvárt P, Gecse Zs, Szabó I (2008): Permo-mesozoic formations of the Recsk-Darnó Hill area: stratigraphy and structure of the Pre-Tertiary basement of the Paleogene Recsk Orefield In: Recsk and Lahóca. Geology of the Paleogene Ore Complex (Ed. Földessy J, Hartai É), Publications of the University of Miskolc, Ser. A, Mining 73, pp. 33-56.
2. Longridge LM, Pálfy J, Smith PL & TIPPER HW (2008): Middle and late Hettangian (Early Jurassic) ammonites from the Queen Charlotte Islands, British Columbia, Canada, *Revue de Paléobiologie*, Geneve 27(1): 191-248.
3. Longridge LM, Smith PL, Pálfy J & TIPPER HW (2008): Three new species of the Hettangian (Early Jurassic) ammonite Sunrisites from British Columbia, Canada, *Journal of Paleontology* 82(1): 127-138. IF: 1,087
4. Magyari EK, Chapman JC, Gaydarska B, Marinova, E., Deli, T., Huntley, J. P., Allen, J. R. M. & Huntley, B. (2008): The 'oriental' component of the Balkan flora: evidence of presence on the Thracian Plain during the Weichselian late-glacial, *Journal of Biogeography* 35(5): 865-883. IF: 3,539
5. Magyari EK, Jakab G, Sümegei P (2008): Holocene vegetation dynamics in the Bereg Plain, NE Hungary - the Báb-tava pollen and plant macrofossil record, *Acta Geographica Debrecina* 42: 39-56.
6. Ósi A (2008): Cranial osteology of *Iharkutosuchus makadiei*, a Late Cretaceous basal eosuchian crocodyliform from Hungary, *Neues Jahrbuch für Geologie und Paläontologie, Abhandlungen* 248(3): 279-299. IF: 0,496
7. Ósi A (2008): Enantiornithine bird remains from the Late Cretaceous of Hungary, *Oryctos* 7: 55-60.
8. Pálfy J (2008): The quest for refined calibration of the Jurassic time scale, *Proceedings of the Geologists' Association* 119(1): 85-95. IF: 0,854
9. Pálfy J (2008): The Triassic–Jurassic boundary In: *The Geology of Central Europe. Volume 2: Mesozoic and Cenozoic* (Ed. Pienkowski G, Schudack ME), Geological Society of London, London, pp. 826-827.
10. Pálfy J, Dulai A, Gasparik M, Ozsvárt P, Pazonyi P & Szives O, (ed.) (2008): Catalogue of Invertebrate and Vertebrate Paleontological Type Specimens of the Hungarian Natural History Museum, Hungarian Natural History Museum, Budapest, p. 209.
11. Ruckwied K, Götz A, Pálfy J & Török, Á. (2008): Palynology of a terrestrial coal-bearing series across the Triassic/Jurassic boundary (Mecsek Mts., Hungary), *Central European Geology* 51(1): 1-15.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-MTM Paleontológiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4,5
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			15
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			15
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	4
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	3	idegen nyelven:	4
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	5,976	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	104
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			89
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	5	poszterek száma <sup>10</sup> :	6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			2
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát:	1
		PhD-t:	1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			78
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			22 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	16,2 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			6
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		8,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8,1 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## PE LEVEGŐKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Gelencsér András, az MTA doktora  
8200 Veszprém, Egyetem. u. 10.  
Telefon: (88) 624-368, Fax: (88) 624-454  
e-mail: gelencs@almos.uni-pannon.hu

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

A légköri szerves aeroszol képződésének vizsgálata, különös tekintettel a felhővízben és aeroszolrészecskéken lejátszódó folyamatokra. A másodlagos aeroszolképződés hozzájárulásának becslése a szerves aeroszol légköri koncentrációjához, kémiai összetételének alakításához. A légköri aeroszol részecskék optikai tulajdonságainak vizsgálata közvetlen (szórási és elnyelési együtthatók mérése) és közvetett (látótávolság adatok alapján) módszerekkel. Az aeroszol részecskék higroszkópos viselkedésének, valamint a higroszkóposág következményeinek tanulmányozása: az aeroszol részecskék tömegkoncentrációjának meghatározásában fellépő bizonytalanság becslése.

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

Háttér-légszennyezettség mérő állomáson fotokémiai szmog időszakában gyűjtött aeroszolminták esetében a szerves kén tömegkoncentrációját illetve annak méret szerinti eloszlását határozták meg két, egymástól független nagy érzékenységű analitikai módszer segítségével. A minták vizes extraktumából a szulfát és metánszulfonát ionokat ionkromatográfiával határozták meg, az összes vízoldható kén tömegkoncentrációjának mérését pedig röntgenfluoreszcens spektrometria módszerével végezték. A szerves kén tömegkoncentrációját az összes kén és az ionkromatográfiával mért kénvegyületek (szulfát és metánszulfonsav) koncentrációjának különbségéből becsülték. Az összes kén valamint a vizsgált kéntartalmú vegyületek egyes impaktorfokokozatokon mért tömegkoncentrációjának bizonytalanságát kísérleti úton, a hibaterjedés szabályainak figyelembe vételével határozták meg. A szerves kén tömegkoncentrációját az összes kéntartalom 6-12%-ának találták, ami a nagy bizonytalanságok ellenére is számottevő része lehet a máig azonosítatlan másodlagos szerves aeroszol tömegének vidéki aeroszolban a nyári időszakban (feltételezve, hogy a C:S moláris arány átlagos értéke 6, a szulfát-észterek hozzájárulása az összes szén tömegkoncentrációjához akár 8-50% is lehet).

A szerves szulfát-észterek tömegkoncentrációinak méreteloszlásából következtettek azok lehetséges képződési mechanizmusára. Feltételezték, hogy e vegyületek kevéssé illékony karbonilvegyületek abszorpcióját követően kénsavgőz kemiszorpciója során keletkeznek, aminek következtében a részecskék felületén termikusan stabil filmréteg alakul ki. Mivel a kénsav közvetlenül a fosszilis tüzelőanyagok égetéséből származó kén-dioxidból, míg a karbonilvegyületek elsősorban növényi kibocsátásból származnak, ez a mechanizmus tipikus példa az antropogén és természetes források egymást erősítő légköri kölcsönhatására.

A levegőminőségi szabályozásban szereplő „szálló por” (PM10) tömegkoncentráció szabványos mérése szempontjából rendkívül fontos az ún. hiszterézis jelensége, ami azt jelenti, hogy az aeroszolrészecskék a mintavétel során környezeti relatív nedvességtartalomnál felvett víz tömegének egy részét a szabványos tömegmérésre előírt 50 %-os relatív nedvességtartalomnál megtartják. A jelenséget a kondicionálás időtartama nem befolyásolja, hiszen termodinamikai egyensúlyi állapotok különbözőségéről van szó. A

jelenség vizsgálata fontos, mert azok a részecskék, amelyek a RH csökkenésével nem vesznek el a teljes felvett vízmennyiséget módosíthatják a részecskék méret szerinti eloszlását, illetve a PM10 (szálló por) tömegkoncentráció látszólagos növekedését eredményezhetik. A visszatartott víz mennyiségét az 50%-os RH értéknél mért hiszterézis értékével határozták meg. A méret szerint gyűjtött aeroszolminták vizsgálata során megállapították, hogy városi környezetben az aeroszolrészecskék vízfelvétele kisebb, mint a háttéraeroszol esetében, ahol a nukleációs módban a legnagyobb mértékű az aeroszol tömegegységre vonatkozó relatív vízfelvétel. A Budapesten gyűjtött aeroszolminták és a Vituki Kht. által országos mérőhálózatban használt DIGITEL mintavevőnél alkalmazott szűrőtípusok jelentős mennyiségű vizet kötnek meg nagyobb relatív nedvességtartalomnál (pl. 77 % RH-nál az üvegszál szűrőre gyűjtött minta mért tömege 43 %-kal nőtt meg a vízfelvételnek köszönhetően, és a felvett víz 48 %-a a hiszterézis jelensége miatt a mérés során beállított 50 % relatív nedvességtartalomnál is megmaradt). Ez arra utal, hogy a PM10 szabványos mérések során tekintettel kell lenni a mintavételi körülményekre és az esetenként jelentős mérési hibát okozó vízfelvétel korrekciójára megfelelő módszereket kell kidolgozni.

A légköri aeroszol részecskék fénygyengítési együtthatónak rendszeres mérése folytatódott az Országos Meteorológiai Szolgálat k-pusztai mérőállomásán. Az összegyűlt adatsor (2007-2008) alapján megkezdhető az optikai paraméterek (450, 550 és 700nm-es hullámhosszon mért teljes és visszaszórt szórási együttható, valamint az 545nm-es hullámhosszon mért elnyelési együttható) értékelése. Az előzetes eredmények szerint jelentős évszakos változás figyelhető meg az optikai tulajdonságok értékeiben. Pl. a szórási együtthatók (a teljes és a visszaszórt egyaránt) átlagos értékei télen, mindhárom hullámhosszon 2-3-szor nagyobbak, mint a többi évszakban. Az éghajlati modellek számára fontos fényvisszaszórási hányad (a visszaszórt és a teljes szórási együttható aránya) hullámhosszanként különböző, 450, 550, 700 nm hullámhosszon rendre 0,10, 0,15 és 0,20.

Mintaelőkészítési és gázkromatográfhoz kapcsolt tömegspektrométeres (GC-MS) módszert fejlesztettek/adaptáltak forrásazonosításra alkalmas szerves vegyületek mennyiségi meghatározásához. A GC-MS eredményeket aeroszol tömegspektrométeres (AMS) adatokkal, illetve NMR és szén izotópos ( $^{14}\text{C}$ ) vizsgálatok eredményeivel kombinálva kívánják meghatározni a légköri aeroszol forrásait.

A déli Atlanti-óceánról származó mérési eredményekből a szerves aeroszol tömegkoncentrációját határozták meg óceáni aeroszolban, és azt a déli óceáni háttérnél valamivel magasabbnak találták. Nagyobb koncentrációkat a kontinenssel érintkező, a szabad troposzférából származó, illetőleg egy alkalommal nagy biológiai produktivitású szubantarktiszi területéről érkező légtömegek esetében észleltek. Több száz akkumulációs mérettartományba eső részecske elektronmikroszkópos (TEM) és elemtérkép-vizsgálatával, melyek közt biológiailag aktív területekről is származó minták is voltak, megállapították, hogy tiszta, fénytörő szerves részecskék önállóan nem fordultak elő. Ebből arra következtettek, hogy a feltételezésekkel ellentétben a déli óceán fölötti keveredési rétegben nincs nyoma számottevő mértékű másodlagos aeroszol képződésnek. A fénytörő szerves anyag többségét tengeri só részecskék mellett, gélszerű vagy tipikus szál as anyag formájában találták meg, ami alapján elsődleges eredetet valószínűsítettek.

A kutatás eredményei hozzájárulhatnak a levegőszennyezés (a fotokémiai szmog) kialakulásának és tulajdonságainak pontosabb megértéséhez, valamint a globális légköri kémiai folyamatok természetének jobb megismeréséhez. Az eredmények alapján pontosabban becsülhető a másodlagos aeroszolképződés hozzájárulása a szerves aeroszol légköri



koncentrációjához, amely így modelleken keresztül az emberi tevékenységből származó aeroszol éghajlati hatásainak pontosabb megértését is lehetővé teszi. A kutatások finanszírozása gyakorlatilag teljes mértékben pályázati forrásokból történt, a kutatásokban a kutatócsoport tagjain kívül PhD-hallgatók és témán foglalkoztatott további munkatársak is részt vettek.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az Európai Unió projektjei keretein belül együttműködés alakult ki az alábbi intézetekkel: University of Helsinki; The French National Center for Scientific Research; Leibniz-Institute for Tropospheric Research; Institute of Atmospheric Sciences and Climate, Forschungszentrum Jülich GmbH; University of Copenhagen; University of Manchester; University of Aveiro; CNR-ISAC, Bologna

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

Részvevői az FP6 IP- 036833-2 „European Integrated project on Aerosol Cloud Climate and Air Quality interactions” pályázatnak, amelynek keretében aeroszolkémiai mérések, valamint az FP6 RII3-026140 „European Super-sites for Atmospheric Aerosol Research” pályázatnak, ahol az aeroszol mintavételi és mérési infrastruktúra fejlesztése a feladatuk. Az EU-6 „OOMPH” projekt keretében az óceánok fölött a szerves aeroszolrészecskék eredetét vizsgálták. Az OTKA TS049845 pályázat keretében a beszámolóban ismertetett fő kutatási tevékenységüket végezték. Részt vettek „A környezeti levegő aeroszol-szennyezettségére vonatkozó új EU szabályozás betartását elősegítő műszerek és mérési eljárások fejlesztése” című Jedlik Ányos pályázatban is.

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

1. Molnár, A., Mészáros, E., Imre, K., Rüll, A., Trends in visibility over Hungary between 1996 and 2002. *Atmos. Environ.*, 2008, 42, 2621-2629.
2. Imre, K., Molnár, A., Hygroscopic behavior of Central European atmospheric background aerosol particles in summer, *Időjárás*, 2008, 112, 63-82.
3. Pio, C.A., M. Legrand, C.A. Alves, T. Oliveira, J. Afonso, A. Caseiro, H. Puxbaum, A. Sanchez-Ochoa, A. Gelencsér, Chemical composition of atmospheric aerosols during the 2003 summer intense forest fire period, *Atmos. Environ.*, 2008, 42 (32) 7530-7543.
4. Lukács, H., Gelencsér, A., Hoffer, A., Kiss, G., Horváth, K., Hartyáni, Z., Quantitative assessment of organosulfates in size-segregated rural fine aerosol *Atmos. Chem. Phys. Discuss.* 2008, 8, 6825-6843

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-PE Levegőkémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	4	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	2
levelező tag:	0	rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			4
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			4
Ebből impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	2
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	2
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	5,098	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	388
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			322
Magyarul könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
jegyzet:		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	1
levelező tag:	0	rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	ebből külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	2	poszterek száma <sup>10</sup> :	3
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			4
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	3
PhD-t:			3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			290
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			24 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	53,7 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			4,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8,6 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	39 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			1,5 MFt

## PPKE-SE NEUROBIOLÓGIAI ÉS INFOBIONIKAI PLASZTICITÁS KUTATÓCSOPORT

Roska Tamás, az MTA rendes tagja  
1083 Budapest, Práter u. 50/a.,  
Telefon: 886 4703, Fax: 886 4724  
e-mail: roska@sztaki.hu

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

Hogyan kapunk el egy felénk repülő labdát? Hogyan vesszük észre az ismerősünket a vasútállomáson várakozó tömegben? Kutatócsoportunk munkájának célja ilyen egyszerűnek tűnő, mégis mesterséges rendszerekben eddig nem megvalósított feladatok háttérét képező idegrendszeri folyamatok jellemzése, kvantitatív modellezése és ezen modellek implementációja robotvezérlési algoritmusokban. Kiemelt hangsúlyt kap a környezethez alkalmazkodni képes, plasztikus érzékelő és motoros funkciók idegrendszeri mechanizmusainak kutatása és ezek kvantitatív, neuromorf modellezése. A neurobiológiai kutatások állatmodelleken valamint a legújabb funkcionális agyi képalkotó módszerek segítségével embereken történnek. Kutatócsoportunk sajátos területe az infobionika és a neurobiológiai plaszticitás. Kutatásaik a következő témacsoportok köré szerveződnek:

*Mozgásmintázatok dinamikus modellezése és implementációja robotokon: az EEv2 bipedál robot.* Célunk egy olyan rendszer elkészítése, ahol az emberi mozgás vizuális visszacsatolás mellett segíti a gépi járás vizsgálatát. Robottalpra szerelt 3D tapintás szenzorokkal kiegészítve kísérleti eszközünkkel modellezhető a látás-tapintás-mozgás interakciók. Célunk taktilis, vizuális és további szenzorok illesztése a robothoz.

*A mozgáskoordináció idegrendszeri folyamatai.* Kutatásaink célja a cél-orientált szemmozgás és kézmozgás együttes vizsgálatát, nagy időbeli felbontásban labda-elkapás esetén, monoculáris és binokuláris körülmények között.

*A hippocampusz funkcionális modellje.* A kutatás célja a különböző érzékelő modalitásokból érkező információ integrációjában, a hosszútávú memóriában és a térbeli navigációban alapvető szerepet játszó agykérgi terület, a hippocampusz (ezen belül elsőként a CA1 régió) legfontosabb idegsejt-típusainak részletes biofizikai modellezése valamint a hippocampális hálózati dinamika modellezése.

*Szenzoros kérgi funkciók szerveződése.* Célunk az érzékelés alapjául szolgáló strukturális jellegzetességek vizsgálata főemlősök agykérgében. Továbbá, célunk a nagyskálájú kérgi hálózatok működésének megértése. Hálózatelemző módszerekkel vizsgáljuk 1, az egyes kapcsolatokon és 2, az egyes áréakban lejátszódó lehetséges direkt és indirekt kölcsönhatásokat az áréak között az ismert kérgi hálózatokban.

*A figyelem idegrendszeri folyamatai és plaszticitása.* A kutatások célja a hatékony információkinyerést biztosító, a specifikus ingerkörnyezethez és az aktuális feladathoz alkalmazkodni képes, adaptív látási folyamatok perceptuális és neurális mechanizmusainak jellemzése és modellezése. Különös tekintettel a lényegtelen vizuális információ figyelmi kiszűrése.

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

*Mozgásmintázatok dinamikus modellezése és implementációja robotokon: a EEv2 bipedál robot.* Megtörtént a neuromorf, bioinspirált robotvezérlési modell hardverhez történő

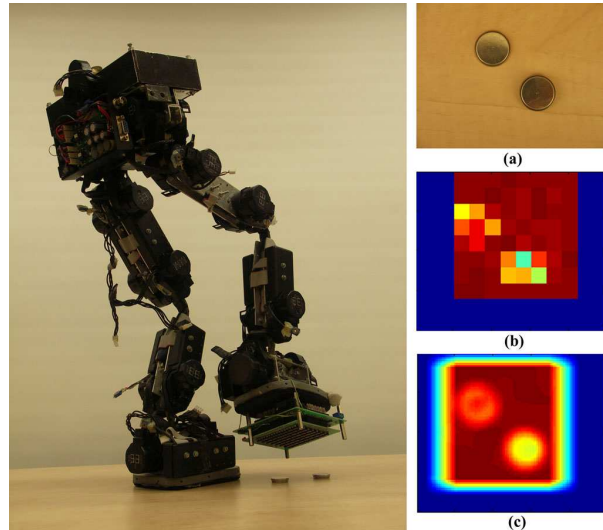
illesztése és implementálása. Robotlábát vezérlő ember tanulásának és adaptációjának segítségével nyert adatok felhasználása a robot és dinamikus modelljének illesztéséhez. Taktilis, vizuális és további szenzorok illesztése a robothoz. Egy olyan 2D infra-LED távolságmérő tömböt készítettünk, amely képes az érzékelő tartományában található felületek 3D térképeinek érzékelésére. Az eszköz alkalmas arra, hogy kétlábú robot un. biped talpára szerelve releváns információt adjon a talaj minőségéről és az esetleg ott található objektumokról mielőtt még a robot a talajjal fizikai kapcsolatba kerülne.

*Mozgáselemzés, specifikus motoros programok modellezése.* Kidolgoztunk egy eljárást a szem-és a kézmozgás egyidejű mérésére, mely lehetővé teszi a kézmozgás kinematikai jellemzőinek és a szemmozgások pontos paramétereinek meghatározását.

*A hippocampusz funkcionális modellje.* CA1 piramissejt-modellben sikerült reprodukálni a dendritágak erősségének megváltozását az A-típusú kálium-csatornák lokális modulációján keresztül. A modell azt jósolja, hogy a dendritikus plaszticitás jelentős háttéraktivitás esetén is lényegesen növeli az érintett dendritágra érkező bemenetek hatását a sejt kimenetére, és szinergikus módon képes kölcsönhatni a hagyományos szinaptikus plaszticitással. Továbbá, sikerült zárt alakban felírható kvantitatív modellt találni a több feszültségfüggő konduktanciát tartalmazó, egyszerű dendritfával rendelkező neuronális modellek impedanciájára.

*Szenzoros kérgi funkciók szerveződése.* A Szemerédi-lemma alapján kidolgozott sztochasztikus hálózati klaszterezési eljárás alapján az eddig közölt ennél alkalmasabb kérgi összekötöttségi hálózat-rekonstrukciót valósítottuk meg és predikciókat tettünk ismeretlen, kísérletesen tesztelhető kérgi kapcsolatok meglétére. Továbbá, jellemeztük az elemi tapintási funkciójú kérgi modulok összeköttetéseit a szomatoszenzoros kéregben. Kimutattuk, hogy főemlősökben az area 3b-ben a kapcsolatok submodalitás-specifikusak és szomatotópiát mutatnak a szomszédos ujjak kérgi reprezentációjával kialakított összeköttetéseikben.

*A látás és vizuális figyelem idegrendszeri folyamatai és plaszticitása.* Azonosítottuk és jellemeztük az irreleváns vizuális mozgásinformáció kiszűréséért felelős neurális hálózatot. Elsőként sikerült bizonyítékot szolgáltatnunk arra, hogy gyakorlással fokozható a lényegtelen vizuális ingerek kiszűrésének hatékonysága. Továbbá, jellemeztük a tompalátó betegek foveális tárgyfeldolgozási folyamataiban jelentkező zavarokat. Eredményeink arra engednek következtetni, hogy speciálisan tervezett számítógépes gyakorlófeladatokkal javítható a tompalátók foveális tárgyfeldolgozásának hatékonysága.



### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

*Hazai kapcsolatok:* A kutatócsoport a PPKE Információs Technológiai Karán és a Semmelweis Egyetemen működik és a lokális együttműködések mellett az MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézetének több csoportjával is együttműködik.

A kutatócsoport további együttműködő partnerei: MTA KOKI, Agykéreg Kutatócsoport, Budapest; MTA-KFKI Rézecske és Magfizikai Kutatóintézet, Biofizika, Budapest; MTA

Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet, Budapest; BME Kognitív Tudományi Tanszék és Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék, Budapest

A Tateyama és NVIDIA nemzetközi cégek eszköztámogatással segítették a kísérleti munkát. Varinex Kft. 3D prototípusgyártással technológiai segítséget adott a robotikai kísérletekhez és fejlesztésekhez.

*Nemzetközi kapcsolatok:* 1. *Téma:* European Research Network for Investigating Human Sensorimotor Function in Health and Disease (ERNI-HSF). 2007-11; *Steering Committee Member:* Vidnyánszky Zoltán; 2. *Téma:* A szomatoszenzoros kérgi funkciók szerveződése, Roe A.W. Vanderbilt Univ., USA; 3. *Téma:* A figyelmi szelekció plaszticitása. Serences J, Univ. of California, San Diego, USA

A csoport munkájához 6 PhD-hallgató és 12 egyetemi hallgató kapcsolódik. A diákok sikeres munkáját jól mutatja, hogy a 2009 évi OTDK-n 6 diákunk vesz részt.

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

British Council Researcher Exchange Programme award (2009-2010) Neurobiological basis of developmental dyslexia.

3. Magyar-Olasz Kormányközi Együttműködés (2008–2010) “Sokszenzoros, bioinspirált robotirányítás celluláris érzékelő hullámszámítási technológiával”

4. OTKA CNK (2009-2012) Koherens tulajdonságrendszerek a mesterséges és az emberi látásban (Bírálat alatt).

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

1. G. Gandhi, Gy. Cserey, J. Zbrozek, and T. Roska, „Anyone can build Chua's circuit: Hands-on-experience with chaos theory for high school students”, International Journal of Bifurcation and Chaos, 2008. (accepted).
2. Rák, G. B. Soós, and Gy. Cserey, „Stochastic bitstream based CNN and its implementation on FPGA”, International Journal of Circuit Theory and Applications, 2008. (accepted).
3. A. Tar, G. Gandhi, and Gy. Cserey, „Hardware implementation of CNN architecture based test bed for studying synchronization phenomenon in oscillatory and chaotic networks”, International Journal of Circuit Theory and Applications, 2008. (accepted).
4. G. B. Soós, A. Rák, J. Veres, and Gy. Cserey, „GPU boosted CNN simulator library for graphical flow based programmability”, EURASIP Journal on Advances in Signal Processing, 2008. (accepted).
5. Négyessy L, Nepusz T, Zalányi L, Bazsó F. (2008) Convergence and divergence are mostly reciprocated properties of the connections in the network of cortical areas. Proc Biol Sci. Jul 15. [Epub ahead of print]
6. Nepusz T, Petróczi A, Négyessy L, Bazsó F. (2008) Fuzzy communities and the concept of bridgeness in complex networks. Physical Review E, 77:016107.
7. Paffen, C.L.E., Verstraten, F.A.J. & Vidnyánszky, Z. (2008) Attention-based perceptual learning increases binocular rivalry suppression of irrelevant visual features Journal of Vision 8(4):25, 1-11.
8. Kovács, G., Cziraki, C., Vidnyánszky, Z., Schweinberger, S.R. & Greenlee, M.W. (2008) Position-specific and position invariant face aftereffects reflect the adaptation of different cortical areas. NeuroImage 43(1):156-164.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-PPKE Infobionikai és Neurobiológiai Plaszticitás Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	9	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			16
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	0
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	14
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	33,003	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	324
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			282
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	2	poszterek száma <sup>10</sup> :	6
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	14	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	12	Diplomamunkát:	5
		PhD-t:	6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			198
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			40,2 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	1	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	43,6 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## SZTE ANALÍZIS ÉS SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Totik Vilmos, az MTA rendes tagja  
6725 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.  
Telefon: (62) 544089, Fax: (62) 544548  
e-mail: totik@math.u-szeged.hu

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

*Harmonikus és Fourier-analízis, potenciálmélet.* A statisztikus fizika univerzalitási hipotézisének vizsgálata általános halmazokon. Christoffel függvények aszimptotikájának vizsgálata görbéken és görbék unióján.

*Fourier-módszer a határeloszlás-elméletben.* Határeloszlás-tételek, konvergencia sebessége és aszimptotikus sorfejtések a kuponygyűjtő problémára. Általánosított szentpétervári játékok elemzése, szemistabilis eloszlások. A Szentpétervári Probléma teljes feloldása valószínűségszámítási módszerekkel (Fourier-analízis nélkül).

*Funkcionál- differenciálegyenletek kvalitatív vizsgálata,* lokális és globális dinamika. Globális attraktorok nem-monoton késleltetett visszacsatolásnál. Influenza-pándémia modellje késleltetett hatással és gyógykezelési stratégiák kidolgozása. Epidemiológiai modellek végtelen késleltetéssel, fertőzés perzisztenciája. Másodrendű differenciálegyenletek és mechanikai rendszerek dinamikája.

*Véletlen párosítási algoritmusok gráfokon.* Gráfok négyzetmentes színezése.

Az elért eredmények közzététele rangos nemzetközi folyóiratokban és konferencia ill. szemináriumi előadásokon keresztül.

Az SZTE Bolyai Intézetében folyó oktatás segítése előadások és szemináriumok tartásán ill. tehetséggondozó szeminárium szervezésén, nemzetközi matematikaversenyeken keresztül.

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

A kutatócsoport az alábbi témákban ért el eredményeket (résztevő kutatók száma / ebből a kutatócsoport tagja) [referencia]:

#### *Influenza pándémia modellezése (5/1)[1-3]*

A matematikai járványtanban egyre komplexebb differenciálegyenletes modelleket használnak, melyek gyakran időben késleltetett visszacsatolást is tartalmaznak. Az [1],[3] dolgozatok influenza pándémia terjedését modellezzik egy populációban, amikor az elsődleges stratégia antivirális szerek alkalmazásából áll. [1] meghatározza az  $R_0$  reprodukciós számot a többi paraméter függvényében, tekintetbe véve a fertőződés az orvoshoz fordulás között eltelt idők eloszlását is.  $R_0$  meghatározza a dinamikát. [3] figyelembe veszi a rezisztens törzs kialakulásának lehetőségét is. Fontos gyakorlati következmény, hogy egy adaptív (a járvány lefolyásához időben alkalmazkodó) gyógyszerelési stratégia jobb kimenetelt ad, mint a konstans gyógyszerelésű stratégiák közül bármelyik. [2] egy általános epidemiológiai modell dinamikáját írja le időben változó fertőzékenység mellett.

1. Alexander, M. E., Moghadas, S. M., Röst, G. and Wu, J., A Delay Differential Model for Pandemic Influenza, *Bull. Math. Biol.* 70: (2) 382-397 (2008)
2. Röst, G. and Wu, J., SEIR epidemiological model with varying infectivity and infinite delay, *Math. Biosci. Eng.* 5(2), 2008, 389-402

3. Moghadas, S.M., Bowman, C.S., Röst, G. and Wu, J., Population-wide emergence of antiviral resistance during pandemic influenza, *PLoS ONE*, 3(3): e1839, 2008

#### *Gráfelmélet (4/2)[4-6]*

A [4] dolgozat egy extrémális gráfelméletbeli tételt igazol a Szemerédi-féle regularitási lemma felhasználásával jól-szeparálható feszítő részgráfok beágyazhatóságáról. Randomizált algoritmusok eredményességével foglalkozik [5] az online párosítási játék tetszőleges metrikus térben vett változatában. [6] olyan gráfokat konstruál, amelynek négyzetmentes színezéséhez szükséges színek száma a tekintett sétáktól függ, megoldva Brešar és Klavžar öt évvel ezelőtt kitűzött problémáját. Megmutatja továbbá, hogy a minimális színszám algoritmikusan kiszámolható.

4. Csaba, B., On embedding well-separable graphs, *Discrete Mathematics*, 308 (2008), no. 19, 4322–4331
5. Csaba, B., Pluhár, A., A randomized algorithm for the on-line weighted bipartite matching problem, *Journal of Scheduling*, Volume 11, Issue 6 (December 2008) 449–455
6. Barát, J., Varjú, P.P., On square-free edge colorings of graphs, *Ars Combin.*, 87 (2008), 377–383

#### *Valószínűségszámítás (3/2)[7-8]*

A [7] cikkben összetartó aszimptotikus sorfejtéseket bizonyítunk általánosított szentpétervári véletlen változók speciális alakú lineáris kombinációira. A sorfejtések megfelelő szemistabilis eloszlások vegyes parciális deriváltjainak Fourier–Stieltjes transzformáltjaival vannak megadva.[8] Karamata-tételének sztochasztikus kiterjesztésével gyenge törvényeket igazol független, azonos eloszlású nemnegatív véletlen változók lineáris kombinációira.

7. Csörgő S, Kevei P: Merging asymptotic expansions for cooperative gamblers in generalized St. Petersburg games, *Acta Mathematica Hung.* 121(1–2), 119–156, 2008
8. Csörgő, S. and Simons, G. Weak laws of large numbers for cooperative gamblers, *Period. Math. Hungar.*, 57(2008), 31–60.

#### *Ingamozgások (2/1)[9-10]*

A [9] dolgozat változó együtthatós ingaegyenlet kis oszcillációit vizsgálja, valamint áttekinti azt a nagy médiafigyelmet is kiváltott szegedi eredményt, hogy a periodikusan gerjesztett ingának kaotikus mozgásai is vannak. Ezt még 1999-ben J. Hubbard figyelte meg számítógépes szimulációk során, és a közelmúltban sikerült bebizonyítani. A dolgozat ismerteti a bizonyítás főbb eszközeit. [10] holonóm mechanikai rendszerek kis oszcillációjára ad elégséges feltételeket, melyek alkalmazhatók a harmonikus oszcillátorra és kettős ingára is.

9. Hatvani, L., Stability problems for the mathematical pendulum, *Period. Math. Hungar.*, 56(2008), 71–82.
10. Guglielmi, N. and Hatvani, L., On small oscillations of mechanical systems with time dependent kinetic and potential energy, *Discrete Contin. Dyn. Syst.* 20(2008), 911–926.

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

A kutatócsoport tagjai előadásokat tartottak az alábbi konferenciákon és szemináriumokon:

- Dublin City University Seminar, Dublin, Írország
- AIMS konferencia, Arlington, Texas, USA
- DEDS konferencia, Baltimore, Maryland, USA
- Diff Eq Appl Math Bio, Le Havre, Franciaország
- Intern. Conf. on Differential and Difference Eqs., Veszprém



- Boundary Value Problems, Santiago de Compostela, Spanyolország
- 13th Austrian, Croatian, Hungarian, Italian and Slovenian Meeting of Young Statisticians, Balatonfüred
- Sztochasztika szeminárium, Zürich, Svájc
- BME Sztochasztika szeminárium
- IXth International Conference of Approximation and Optimization in the Caribbeans, San Andres, Kolumbia
- INTERREG IIIA Community Initiative Program HUSER0602/066, Computer-aided Modelling and Simulation in Natural Sciences, Szeged
- Morgan Stanley Mathematical Modelling Center, Budapest
- Differential Equations, Function Spaces, Approximation Theory, Int. Conf 100th Anniversary of the Birthday of S. L. Sobolev, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Oroszország
- Csörgő Sándor emlékelőadás, MTA III. osztály
- Együttműködés történet kanadai, USA-beli, olasz, spanyol, svájci kutatókkal.

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

A kutatócsoport külön nem pályázott más támogatásra. Futó OTKA-pályázatokban részt vesznek kutatócsoporti tagok. Röst Gergely részt vesz két nyertes TÉT-pályázatban a 2009-2010-es időszakban (magyar-spanyol, magyar-kínai).

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

##### *Járványterjedés dinamikája időben változó fertőzőképesség mellett (2/1)*

A járványtani modellek egyik klasszikus alaptípusa az SEIR-modellek. A szerzők bevezetnek egy új típusú SEIR differenciálegyenletes-modellt, amely megengedi, hogy egy egyed fertőzőképessége a fertőzés óta eltelt idő szerint változhat. A modell annyira általános, hogy a fertőzőképesség időbeni megváltozásánál bármely sima függvényt megenged. Matematikailag ez egy olyan funkcionál-differenciálegyenlet-rendszerre vezet, amelyben végtelen időbeli késleltetés szerepel. Ez okoz bizonyos technikai nehézségeket (pl. a fázisteret is okosan kell megválasztani, hogy kompaktság teljesüljön). Ezen technikai problémák áthidalásával a klasszikus SEIR-modellekre jellemző dinamikai tételek bizonyíthatók erre az általánosabb modellosztályra. Meghatározható a legfontosabb epidemiológiai paraméter, az elemi reprodukciós szám ( $R_0$ ). Gyors lefolyású járvány esetén a standard végállapot-egyenlet teljesül. Demografikus időskálán pedig, ha  $R_0 < 1$ , akkor a betegség-mentes egyensúly globálisan aszimptotikusan stabil és ez az egyetlen egyensúlyi helyzet (ez azt jelent, hogy a járvány kihál). Ha viszont  $R_0 > 1$ , akkor létezik egy stabil endemikus egyensúly és egy végtelen dimenziós perzisztencia-tétel alkalmazásával megmutatható, hogy a betegség állandóan jelen lesz a populációban. A dolgozat eredményeit továbbfejlesztve a közelmúltban C. McCluskey kanadai matematikus talált egy alkalmas Ljapunov-funkcionált, amely segítségével az endemikus egyensúly globális aszimptotikus stabilitása is bebizonyítható.

Röst, G. and Wu, J., SEIR epidemiological model with varying infectivity and infinite delay, *Math. Biosci. Eng.* 5(2), 2008, 389-402

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			10
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			10
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	7
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	3
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	0	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			0
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	12	poszterek száma <sup>10</sup> :	0
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			5
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	0
		PhD-t:	0
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			120
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			12 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	6 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## SZTE LÉZERFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Bor Zsolt, az MTA rendes tagja  
6720 Szeged, Dóm tér 9.  
Telefon: (62) 544 4273, Fax: (62) 544 658  
e-mail: bor@physx.u-szeged.hu

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

Nemzetközi szintű kutatómunka végzése az ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése és a lézerek spektroszkópiai és anyagtudományi alkalmazásai területén.

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

#### *Ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése*

Egy új módszert dolgoztak ki és valósítottak meg a terawatt csúcsteljesítményű femtoszekundumos titán-zafír lézerrendszer közeli-infravörös impulzusainak látható spektrális tartományba való konvertálására. A módszerrel előállított impulzusok energiája, hullámhossza és ultragyors időtartama lehetővé teszi (i) a korábbiaknál nagyobb pontosságú anyagmegmunkálást, (ii) a biológiai anyagok ultragyors folyamatainak időfelbontású vizsgálatát és (iii) a bakteriorodopszin alapú ultragyors fényvezérelt logikai kapuk készítését. A módszer lehetővé teszi ultranagy lézerteljesítmények előállítását is. A témán 4 fő dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

#### *Lézerek biológiai alkalmazásai*

Sérülékeny biológiai anyagokból fs-os excimer lézerekkel olyan sztöchiometrikus vékonyrétegeket készítettek, melyek alkalmazásával irányított sejtmegtapadást, sejtnövekedést lehetett megvalósítani. A vizsgálatok során egy 450 fs impulzushosszúságú KrF excimer lézerrel végezték a fibronectin, kollagén sejtnövekedést serkentő adalék anyagokból préselt minták ablálását. A demonstrációhoz asztrocita, endoteliális és neuroblasztóma sejtípusokat alkalmaztak. Mátrix anyaggal elősegített lézeres párologtató (MAPLE) elrendezés alkalmazásával sikerült egy enzimből, az ureázból vékonyrétegeket készíteniük excimer lézeres besugárzással. Vizsgálták ezek kémiai összetételét, vastagságát, morfológiáját, biológiai aktivitását. Egy CO<sub>2</sub> lézer 10.6  $\mu\text{m}$ -es nyalábjának és a fenti MAPLE kamra alkalmazásával sikeresen választottak le pepszin vékonyréteget is. A témán 4 fő dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

Egy új projekt keretein belül megépítettek egy lézeres szórás interferencia jelenségén alapuló áramlás-mérő elrendezést, melyet kalibráltak, s meghatározták főbb paramétereit. A módszer alkalmas lehet lágy szövetekben véráramlás érintésmentes detektálására. A témán 2 fő dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa

#### *Lézerek anyagtudományi alkalmazásai*

Folytatták az általuk kifejlesztett, s szabadalmazásra benyújtott hátsóoldali száraz maratási eljárás (LIBDE) tanulmányozását. Megépítettek egy időfelbontásos elrendezést, mellyel a megmunkálandó kvarc-fém felület transzmissziójának időbeli változásait vizsgálták. Tanulmányozták a maratás főbb paramétereinek hullámhosszfüggését. Kimutatták, hogy a maratási sebesség azonos kísérleti feltételek esetén 308, 248 és 193 nm hullámhosszak közül az utóbbi esetben a legnagyobb. Eredményeik alapján lehetőség nyílt a maratási folyamatok pontosabb leírására. Az átlátszó anyagok lézeres megmunkálási módszerei közül ígéretes módszer a hátsóoldali nedves maratás (LIBWE), mellyel sikerült mikrométeres és szubmikrométeres struktúrákat kialakítaniuk kvarc felszínén. A témán 4 fő dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

Az inverz geometriájú impulzuszéres vékonyréteg-építés (az angol szakzsargonba általuk bevezetett elnevezéssel, illetve betűszóval: Inverse Pulsed Laser Deposition, IPLD) témakörében elért kísérleti eredményeiket modellszámításokkal ellenőrizték. Mind az analitikus modell, mind a Monte Carlo számítások alapján kapott eredmények tökéletesen alátámasztották a rétegek vastagságeloszlására és a rétegépítési sebesség nyomásfüggésére vonatkozó kísérleti tapasztalatokat. A témán 3 fő dolgozott, 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

Impulzuszéres vékonyréteg-építéssel és más módszerekkel előállított hidrogénezett és hidrogénmentes rétegeket vizsgáltak spektroszkópai ellipszometriával. A rétegek optikai tulajdonságait a Cauchy-féle diszperziós reláció, a Gaussi és a Tauc-Lorentz oszcillátor modellekkel határozták meg. Megalkották az amorf szén rétegek optikai fázis diagrammját: a rétegek törésmutatójának maximális értékét ábrázolva az azoknak megfelelő fotonenergiák függvényében jól szétváltak a grafit-, gyémánt-, a hidrogénezett grafit-, hidrogénezett gyémánt és a polimerszerű mintákból létrejött csoportok. Ezzel lehetővé vált az amorf szén rétegek típusának gyors, érintésmentes meghatározása spektroszkópai ellipszometriával. Ugyancsak spektroszkópai ellipszometriával vizsgáltak impulzuszéres vékonyréteg-építéssel nitrogénben növesztett titán dioxid vékonyrétegeket. Meghatározták és értelmezték a nitrogéntartalom függvényében a rétegek optikai tulajdonságait. A témán 4 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa.

Femtosekundumos impulzuszérel keltett plazma és anyagfelhő különböző részeinek kialakulását és fejlődését követték nyomon 1 ps és 1.5 ns időtartományban késleltetett ultrarövid fényimpulzus gerjesztésre adott optikai válasz (reflexió és emisszió) mérésével. Az abláló 100 fs hosszú impulzust 1 ps-on belül követte az elektronplazma, ~100 ps-mal később jelent meg az ionplazma, amelyet az atomokból és nanorészecskékből álló felhő 200-400 ps, illetve 600-1400 ps-mal később követett. A keltett nanorészecskéket szilícium hordozókon fogtál fel és elektron-, illetve atomi erő mikroszkópos vizsgálatokkal meghatározták a nanorészecse mérteteloszlást az alkalmazott abláló impulzus energiasűrűségének függvényében. A témán 6 fő dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

Kis zajú nanostruktúrált gáz szenzorokat fejlesztettek ki, amelyekkel pl. NO<sub>x</sub>, CO, H<sub>2</sub>S és vízgőz detektálható. A funkcionizált szén nanocső és félvezető alapú szenzorok ellenállás-fluktuációi teljesítmény sűrűség spektrumának elemzésével javítható a szenzorok kémiai szelektivitása. A szenzor kémiai környezetbe kerülésekor eltolódik az ellenállás értéke. Kísérletileg vizsgálták az ellenállás eltolódást, és elméleti magyarázatot adtak erre a jelenségre. Olcsó és megbízható ellenállás-fluktuáció spektroszkópián alapuló szenzorok piaci bevezetése pár éves időtávtatban megvalósítható. A témán 10-15 fős nemzetközi kutató konzorcium dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

### *Fotoakusztika*

Kifejlesztettek egy fotoakusztikus rendszert, ami alkalmas ammónia koncentráció mérésére ppb alatti felbontással és gradiens mérésre is a földfelszín felett 3 különböző magasságban. Összekapcsolva egy mikro-meteorológiai mérőrendszerrel fluxus mérését is megvalósították. A rendszer több mérési kampányban is tesztelésre került (Skócia, Lengyelország), illetve egy ilyen rendszer több mint 7 hónapja működik folyamatosan a Bugaci mérőállomáson. A rendszert ellátták egy önellenőrző funkcióval: egy mechanikai mozgatószerkezet meghatározott időnként automatikus módon azonos magasságra hozza a mintavevő fejeket, ilyenkor a mérőcsatornák jelét a rendszer automatikusan egymáshoz igazítja.

Megnövelt stabilitású négy-hullámhosszú (1064, 532, 355 és 266 nm) fotoakusztikus korommérő-rendszert hoztak létre, amely alkalmas mind labor- mind terepi körülmények között aeroszolok optikai abszorpciós mérésekre. Az optikai abszorpciós együtthatóra kalibrált rendszerrel méréseket végeztek mesterséges módon generált aeroszol mintákon, amely mérésekkel bebizonyították, hogy a fotoakusztikus rendszerrel meghatározott optikai abszorpciós koefficiensek megegyeznek az indirekt módon (extinkció mínusz szórás) meghatározott értékekkel. Megállapították, hogy a 4 hullámhosszon a különböző aeroszolfajták (pl. szerves és szervetlen aeroszolok és természetes porok ebben a széles

hullámhossz-tartományban eltérő karakterisztikájú spektrumokkal rendelkeznek, azaz esély van a szelektív aeroszol mérésre, illetve a forrásbeazonosításra, ami azonban még további kutatómunkát igényel. A rendszert terepi mérésekben is tesztelték (pl. JRC Ispra) és az egyéb módszerekkel jól egyező eredményeket kaptak. A fotoakusztikai témákon 6 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa. A fotoakusztikus eredmények hasznosításában részt vesz a HILASE Kft.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport hazai partnerei közé tartozik a SOTE és a SZTE Szemészeti Klinikái, a SZTE-MTA Dermatológiai Kutatócsoportja, az MTA SzBK, SZFKI, MFA, ATOMKI és az ELTE kutatóhelyei, a MOL NyRt. a Semilab ZRt és a Videoton Holding ZRt. A kutatók folyamatos munkakapcsolatban álltak a TU München Kémiai Intézetével, a Forschungszentrum Karlsruhe-val (Németország), a Laboratoire d'Optique Appliquée, Groupe Etude des Lasers Femtosecondes csoporttal (Palaiseau, Franciaország) az Uppsala University Angstrom Laboratóriumával (Svédország), a National Institute for Lasers, Plasma and Radiation Physics, Lasers Department-jével (Bucharest-Magurele, Románia), a Texas A&M University villamosmérnöki tanszékével valamint a FORTH Lézer Laboratóriumával (Görögország).

A kutatócsoport tagjai a SZTE Optikai és Kvantumelektronikai Tanszéke oktatási feladatainak ellátásában éves szinten mintegy 830 óra megtartásával vállaltak részt. Továbbá 3 PhD-hallgató, 12 diplomamunkát és 2 szakdolgozatot író, valamint 3 tudományos diákköri munkát végző hallgató munkáját irányították.

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

A 2008-es év folyamán a kutatócsoport tagjai 2 hazai (1 OTKA és 1 Jedlik) pályázatot nyertek el. Emellett több futó hazai (2 OTKA, 1 NKTH) és 2 db EU FP6 pályázat finanszírozta a kutatási költségeket.

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

1. Böhme R, Vass CS, Hopp B, Zimmer K Sub-wavelength ripples in fused silica after irradiation of the solid/liquid interface with ultrashort laser pulses Nanotechnology, 19 (49) : art. no. 495301 (2008)
2. Heszler P, Gingl Z, Mingesz R, Csengeri A, Haspel H, Kukovecz Á, et al Drift effect of fluctuation enhanced gas sensing on carbon nanotube sensors Physica Status Solidi (B), 245 (10) : 2343-2346 (2008) társszerzők száma 16, a kutatócsoportból Heszler Péter
3. Hopp B, Smausz T, Papdi B, Bor Zs, Szabó A, Kolozsvári L, et al. Laser-based techniques for living cell pattern formation Applied Physics A, 93 (1) : 45-49 (2008) társszerzők száma 8, a kutatócsoportból Hopp Béla és Bor Zsolt
4. Huszár H, Pogány A, Bozóki Z, Mohácsi Á, Horváth L, Szabó G. Ammonia monitoring at ppb level using photoacoustic spectroscopy for environmental application Sensors and Actuators, B, 134 (2) : 1027-1033 (2008)
5. Jegenyés N, Etchepare J, Reynier B, Scuderi D, Dos-Santos A, Tóth Zs Time-resolved dynamics analysis of nanoparticles applying dual femtosecond laser pulses Applied Physics A, 91 (3) : 385-392 (2008)
6. Budai J, Tóth Zs. Optical phase diagram of amorphous carbon films determined by spectroscopic ellipsometry Physica Status Solidi (c), 5 (5) : 1223-1226 (2008)
7. Fotoakusztikus ammónia és korommérő rendszer.

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	9	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			23
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			23
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	15
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	6	idegen nyelven:	2
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	24,031	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	154
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			136
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	1
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	2	posztterek száma <sup>10</sup> :	3
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			6
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	12
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	3
			830
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			38,7 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	45,3 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	16 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	9 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			8,5 MFt

## SZTE MESTERSÉGES INTELLIGENCIA KUTATÓCSOPORT

Csirik János, az MTA doktora  
6720 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.  
Telefon: (62) 544-126, Fax: (62) 425-508  
e-mail: csirik@inf.u-szeged.hu

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

A csoport a beszámolási évben alapvetően ugyanazokon a területeken folytatott kutatásokat, mint az előző évben. Tovább erősödött azonban a nyelvtechnológiai kutatás-fejlesztés súlya, köszönhetően a befogadó intézmény, az SZTE Informatikai Tanszékcsoportja által elnyert nagy volumenű pályázatoknak, melyek megvalósításában a kutatócsoport dolgozói jelentős szerepet vállaltak. Emellett folytatódtak a gépi tanulás elmélete és alkalmazásai terén folyó kutatások, valamint a beszédfelismerési fejlesztések, továbbá a bioinformatika és az önszervező rendszerek területén korábban megkezdett kutatási tevékenységek és együttműködések.

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

*Természetes nyelvi feldolgozás.* 2008-ban a csoport kutatói szövegalapú véleménydetekciós kutatásokba kezdtek, melynek részeként kidolgoztak egy modellt, amely fórumozókat sorol be kategóriákba azok magyar nyelvű hozzászólásait vizsgálva. A webbányászat témakörében elindított kutatásban pedig a kutatókról történő információszerzést (tudománymetrikai adatok) tűzték ki célul azok honlapjai alapján. A munka első lépéseként elkészült egy honlap-korpusz, amely a későbbi gépi tanulási kísérleteket alapozza meg. A biológiai szövegfeldolgozási kísérletek 2008-ban is folytak, ennek részeként elkészült egy génnév-egyértelműsítő módszer, amely a szöveges információkon kívül a társszerzőségi hálózatot is vizsgálja. Az orvosi szövegfeldolgozás témakörében olyan modell kifejlesztésén dolgoztak a csoport kutatói, mely zárójelentések szövegéből automatikusan kivonatolja a bizonyos betegségekre vonatkozó információkat, majd ez alapján a betegségekre vonatkozó diagnózist hozzárendeli a dokumentumhoz. A kifejlesztett modell az I2B2 amerikai konzorcium által elvégzett kiértékelésben a 6. legjobb eredményt érte el (30 intézet rendszere közül). A nyelvfüggetlen névelem-felismerés témában az intézet dolgozói olyan eljárásokat dolgoztak ki, amelyek a névelem-felismerő rendszerek gyakorlati alkalmazhatóságát segítik elő a névelemek normalizálása által. E célból a kutatócsoport munkatársai egy webes gyakorlati adatokon alapuló eljárást dolgoztak ki névelemek szótövesítésére. A csoport WordNettel kapcsolatos kutatásainak elismeréseként 2008-ban Szegeden került megrendezésre a Global WordNet Association soros konferenciája, melynek szervezésében az intézet alkalmazottai is részt vettek. A fentiek mellett a csoport kutatói a természetes nyelvi szövegek modalitásának elemzése témakörében is végeztek kutatásokat – az információkinyerés eme fontos kérdésköre nemzetközileg is kiemelt figyelmet kap az utóbbi években. A csoport munkatársai részt vettek egy, a témához kapcsolódó korpusz elkészítésében, illetve egy, a mondatok spekulatív/állító voltát eldöntő, gyengén felügyelt tanulási módszeren alapuló modell is elkészült. A felsorolt eredményeket szaklapokban és konferenciákon (DMIIP, DAS, I2B2, GWC, TSD) mutatták be a csoport kutatói. Az eredményeket 13 fős kutatói team érte el, melyből 5 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 10 millió Ft volt, továbbá 15 millió Ft pályázati forrásból. A projektek ipari partnerek részvételével futnak, így gazdasági hasznosulásuk bizonyosra vehető.

*Beszédfelismerés.* Folytatódtak a korábbi években megkezdett, a fuzzy aggregációs operátorok beszédfelismerésben való alkalmazására vonatkozó vizsgálatok. A neuronhálós beszédfelismeréssel kapcsolatos kutatások is folytatódtak: a csoport dolgozói ezúttal egy újfajta megoldással, az ún. HMM/ANN tandem architektúrával végeztek kísérleteket, és az Edinburghi Egyetem kutatóival együttműködve a korábbi eredményeiket messze meghaladó felismerési pontosságot sikerült elérniük a magyar nyelvű felismerésben. Az eredményeket 5 fős kutatói team érte el, amelyből 2 dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 8 millió Ft volt, továbbá 1 millió Ft pályázati forrásból. A kifejlesztett technológia gyakorlati alkalmazásra érett, a gazdasági hasznosításhoz a csoport keresi az ipari partnereket.

*Mintafelismerés és gépi tanulás.* A gépi tanulás elmélete terén 2008-ban a csoport dolgozói folytatták kutatásaikat a DNF formulák és a döntési fák kapcsolatára vonatkozóan. Új elméleti eredményeket sikerült elérniük a Boole-függvények döntési fával, illetve diszjunktív normálformával való reprezentációjának tárigényére vonatkozóan. Ezen felül a Ruhr-Universität Bochum kutatóival közösen vizsgálatokat végeztek a statistical query learning-gel és annak kombinatorikus karakterizációjával kapcsolatban, továbbá folytatták a University of Illinois at Chicago kutatóival közösen megkezdett vizsgálatokat az elméletrevízió és belief revision összekapcsolásának lehetőségeiről. Az alkalmazott gépi tanulás terén kidolgoztak egy SVM-alapú modellt idősor-elemzési problémák megoldására, melynek használatával jelentősen sikerült növelni az előrejelzési pontosságot számos idősor-elemzési adatbázison. Az eredményeket 8 fős kutatói team érte el, amelyből 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 6 millió Ft volt, továbbá 2,5 millió Ft pályázati forrásból.

*Bioinformatika.* A csoport kutatói folytatták a Szegedi Biológiai Központtal korábban megkezdett együttműködést a fehérjeklasszifikációra alkalmazható új algoritmusok kifejlesztésének témakörében. E téren egyosztályos tanulóalgoritmusokon, tömörítési alapelveken, illetve fuzzy-elméleten alapuló új módszereket publikáltak. Az egyik új hierarchikus klaszterezési algoritmust egy geográfiai alkalmazásban is kipróbálták, amerikai kutatókkal együttműködve. Az eredményeket 8 fős kutatói team érte el, amelyből 1 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 2 millió Ft volt, továbbá 1 millió Ft pályázati forrásból.

*Önszervező rendszerek.* 2008-ban az önszervező rendszerek témakörében a csoport kutatói három területen értek el eredményeket. Először, korábbi eredményeikre építve, a nagyméretű peer-to-peer hálózatokban új algoritmusokat javasoltak a csomópontok teljesen elosztott módon történő rendezésére. Ezek révén minden csomópont logaritmikus időben képes meghatározni magáról, hogy hányadik a rangsorban (fully distributed ranking problem). Másodsor, pletykaalgoritmusokra építve globális keresőalgoritmusok teljesen elosztott és hibátűrő verzióit javasolták és implementálták, amelyek képesek megbízhatatlan és nagyméretű hálózaton működni. Végezetül, algoritmusokat fejlesztettek ki mobil rádiós hálózatok számára, amelyek segítségével mobil ágensek meghatározott alakzatokat képesek felvenni pusztán lokális kommunikációra alapozva, függetlenül a résztvevők számától és pillanatnyi összetételétől. Az eredményeket egy nemzetközi team érte el, amelyből 1 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás 4 millió Ft volt, továbbá 2 millió Ft pályázati forrásból.

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

Kutatási partnereink a különböző területeken: gépi tanulás elmélete: Ruhr-Universität Bochum, University of Illinois at Chicago, SZTAKI; önszervező rendszerek: norvég, olasz, német, holland, spanyol, angol kutatók; beszédfelismerés: University of Edinburgh; természete-



tes nyelvi feldolgozás: MTA Nyelvtudományi Intézet, Pécsi Tudományegyetem, MTA Pszichológiai Kutatóintézete, MorphoLogic Kft. (pszichológiai szövegelemzési projekt), SZTAKI, GLIA Kft, ELTE Biológia Fizika Tanszék, Universitas Press, MKIK Gazdaság- és Vállalkozáselemzői Kht.(Textrend projekt) Montana Zrt., VPOP, MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet (TUDORKA7), AITIA Zrt, ALL, BME TMIT, Kilgray Kft (Nyelv- és Beszédtechnológiai Platform); bioinformatika: Université Paris.

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

A kutatócsoport dolgozói 2008-ban is jelentős részt vállaltak a csoportot befogadó intézmény, az SZTE Informatikai Tanszékcsoportja által vitt pályázatok feladatainak megoldásában. A pszichológiai célú szövegelemzési projekt (NKFP-19/50/1W075) 2008-ban lezárult, a kutatócsoport az MTA Pszichológiai Kutatóintézet által rendelkezésére bocsátott szövegállomány nyelvtechnológiai eszközökkel történő feldolgozását és a főnevek pszichológiai jegyekkel történő címkézését végezte el. A Textrend (OM-00006/2008) pályázat 2008-ban indult, célja gazdasági és kormányzati döntéshozást támogató keretrendszer létrehozása trendelemző és szövegfeldolgozó eszközökkel. A pályázat első évében megtervezésre került az interdiszciplináris Textrend architektúra. Szintén újonnan indult (és év végével le is zárult) a TUDORKA7 (OM-00145/2007) elnevezésű projekt, melyben az SZTE Informatikai Tanszékcsoportja tudásközpontként jelentősen hozzájárult a VPOP számára készülő szövegbányászati rendszer nyelvi elemeinek kifejlesztéséhez – egyrészt az információkinyerést támogató tudásbázisok építésével, másrészt új információkinyerési technológiák kutatásával. Új nyelvtechnológiai projektként beindult a Nyelv- és Beszédtechnológiai Platform (NTP-07-NYBTPLAT), melynek célja stratégiai terv kidolgozása a területen működő szervezetek kutatási-fejlesztési tevékenységének összehangolására. Ennek első lépéseként a csoport kutatói elkészítették a magyarországi nyelvtechnológia jelenlegi helyzetéről szóló áttekintő tanulmányt. Az ESA Ariadna programjában a „Gossip based strategies in global optimization” című pályázatot sikeresen teljesítették a projekt kutatói (21257/07/NL/CB számú szerződés, 2008 júliusában zárult), ennek során elosztott rendszerekre fejlesztettek adaptív optimalizáló algoritmusokat.

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

1. Tóth, L., Frankel, J., Gosztolya, G., King, S.: Cross-lingual Portability of MLP-Based Tandem Features - A Case Study for English and Hungarian, Proceedings of Interspeech 2008, pp. 2695-2698 (2008)
2. Sloan, R.H., Szörényi B., Turán Gy.: On k-term DNF with largest number of prime implicants, Siam Journal on Discrete Mathematics 21(4): 987-998 (2008)
3. Babaoglu, O., Jelasiy M.: Self-\* properties through gossiping, Philosophical Transactions of the Royal Society A, 366(1881):3747–3757 (2008)
4. Farkas R., Szarvas Gy.: Automatic construction of rule-based ICD-9-CM coding systems, BMC Bioinformatics 9(Suppl 3):S10 (2008)
5. Vincze V., Szarvas Gy., Farkas R., Móra Gy., Csirik J.: The BioScope corpus: biomedical texts annotated for uncertainty, negation and their scopes, BMC Bioinformatics 9(Suppl 11):S9 (2008)
6. Szarvas Gy.: Hedge classification in biomedical texts with a weakly supervised selection of keywords, Proc. of the 45th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (ACL 2008), pp. 281-289, (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	7	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			5
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			36
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			36
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	9
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	27
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	16,927	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	181
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			174
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	9	poszterek száma <sup>10</sup> :	12
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	8
		PhD-t:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			34
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			29,4 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	0 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## SZTE SZTEREOKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Fülöp Ferenc, az MTA levelező tagja  
Telefon: 62-545-564, Fax: 62-545-705  
e-mail: fulop@pharm.u-szeged.hu

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

Ez évben is a kutatóhely fő feladata olyan aszimmetrikus szintézisek vizsgálata, amelyekben katalizátorként királis szerves katalizátorokat, enzimeket, valamint a heterogén katalitikus kémiai reakciók előnyeit ismerve kiemelkedő enantioszelektivitást biztosító különböző típusú királis nanokompozitokat használnak. A vizsgálatok feladata - alapkutatás jellegük mellett – arra is irányul, hogy az előállított vegyületek a gyógyszerkutatásban hasznos, jelentős tudást hordozó királis, biofor építőelemek legyenek. Meghatározó jelentőségű alapkutatási feladat a reakciók mechanizmusának, sztereokémiájának tanulmányozása és ezen belül olyan kiemelten fontos feladatok várnak megoldásra, mint a királis indukció eredetének értelmezése, a reakcióért felelős intermedierek szerkezetének felderítése és számos, a reakciókkal kapcsolatos kérdések megválaszolása.

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

Egyik fő célkitűzés béta aminosav enantiomerek szintézislehetőségeinek vizsgálata, továbbá enantiomer aminoalkoholok szintézise és alkalmazhatóságának vizsgálata volt. Enantiomertiszta monoterpénekből illetve királis aminforrásokat alkalmazva 1,2- és 1,3-aminoalkohol, aminodiol, aminonaftol enantiomereket állítottak elő és azt találták, hogy e vegyületek akár 92% ee értékekkel katalizálják az 1-arilpropanol enantiomerek képződését. Béta aminosavészterek enzimkatalizálta enantioszelektív hidrolízise enantiomertiszta béta aminosavakat eredményezett. Bizonyították, hogy a diexo-3-aminonorbornén-2-karbonsav kiválóan használható királis forrás enantiomer heterociklusok szintéziséhez (3 főből 0,5 kut. csop. tag; 10MFt ráfordításból 3,4 MFt külső forrás).

Prokirális C=C kötést tartalmazó vegyülettípusok közül különböző szerkezetű  $\alpha,\beta$ -telítetlen karbonsavak, telítetlen dikarbonsavak, fluoro telítetlen karbonsavak, dihidropiranyl- és tetrahidropiridil karbonsavak, valamint N-acilamino dehidrokarbonsavak és néhány származékának enantioszelektív hidrogénezését vizsgálták folyadékfázisban sztatikus reaktorokban. Különböző oxidhordozós királis anyagokkal módosított (számos királis módosító közül főként cinkóna alkaloidok és származékaik) palládium katalizátorokat használtak a hidrogénezésekben. A minél nagyobb optikai hozam elérése céljából számos kísérleti paraméter hatását vizsgálták (hőmérséklet, hidrogénnyomás, a királis módosító koncentrációja, adalékanyagok, adagolás módja és sebessége, oldószerek). Az elért legnagyobb optikai hozam 96% volt (4 főből 2 kut. csop. tag; 10MFt ráfordításból 4 MFt külső forrás).

Sikerrel oldották meg nagy térkitöltésű szubsztituenseket és szteránvázat tartalmazó  $\alpha$ -keto-karbonsavészterek hidrogénezését is (az enantioszelektivitás 78-80%). A fenti kísérleti eredményeket összehasonlítva a piroszőlősav etilészter, valamint a fenilglioxilsav etilészter korábbi vizsgálatának azonos körülmények közötti kísérleti adataival, arra a következtetésre lehetett jutni, hogy az Orito-reakció mechanizmusának értelmezésében eddig figyelembe nem

vett tényezőknek jelentős szerepe van. Az előállított királis vegyületek – az eljárások fejlesztése esetén – hasznosítható vegyületek lehetnek a szintetikus szerves vegyiparban, s ezen belül a gyógyszeriparban. Az optimalizálás során összefüggéseket lehetett megállapítani az enantioszelektivitások, a királis módosítók hatása és a hidrogénezendő reaktánsok szerkezete között (3 főből 0,5 kut. csop. tag; 10MFt ráfordításból 2 MFt külső forrás).

Tovább folytatták azokat a vizsgálatokat, amelyek a fentiekben ismertetett enantioszelektív hidrogénezések mechanizmusának minél mélyebb értelmezését tűzték ki célul. A térszerkezeti tényezőknek az Orito reakcióra gyakorolt hatásának tanulmányozása céljából egyes cinkona alkaloidok C3- és C9-szubsztituált származékait is alkalmazták királis módosítóként. A korábbi vizsgálatok folytatásaként emellett, hogy új ismeretekre tettek szert, a legtöbbit kutatott heterogén katalitikus hidrogénezési eljárás, az Orito reakció területén, a kiterjedt kutatások új jelenségek felismeréséhez is vezettek az enantioszelektív heterogén katalízisben.

Prokirális ketonok Pt-katalizálta hidrogénezése mechanizmusának kutatásában NMR-spektroszkópiát, elméleti számításokat, valamint újabb cinkona-alapú királis módosítókat alkalmazva új kísérleti adatokat nyújtottak a hidrogénezés sztereokémiájának mélyebb megismeréséhez, valamint kísérleti bizonyítékokat szolgáltatottak az Orito reakció korábban feltételezett, de eddig nem igazolt un. nukleofil mechanizmusához. A fentieket összegezve, a térszerkezeti tényezőknek az enantioszelektivitásra gyakorolt hatásának további vizsgálata céljából tehát, egyes nem merev szerkezetű cinkona alkaloidok C9-O szubsztituált származékait és merev szerkezetű cinkona alkaloidokat is alkalmaztak királis módosítóként (4 főből 2 kut. csop. tag; 11,2 MFt ráfordításból 4 MFt külső forrás).

Összefoglalóan megállapítható, hogy a szerződésben kitűzött feladatok teljesítésében jelentős előrehaladást tettek. A kísérleti eredményekről 26, nagyrészt a kutatási terület (szerves katalízis, aszimmetrikus szintézisek) elismert külföldi folyóirataiban megjelent dolgozatban számoltak be.

A kutatások során, ill. az egyik megadott szabadalomban (F. Fülöp, Z. Szakonyi: Chiral cyclic amino acids and their derivatives, pharmaceutical compositions containing them and the use of such compounds *PCT Int. Appl.* (2008), 47pp. CODEN: PIXXD2 WO 2008059299 A1 20080522 AN 2008:607702 CAPLUS) új, enantiomertiszta aminosavakat és származékaikat eredményező eljárásokat dolgoztak ki a gyógyszerkutatásban fontos építőelemek szintézisére. A másik megadott szabadalomban kooperációs munka keretében új kinurensavszármazékokat szintetizáltak (L. Vécsei, M. Boros, J. Kaszaki, F. Fülöp, J. Toldi, I. Szatmari, Use of kynurenic acid and derivatives thereof in the treatment of conditions of the gastrointestinal tract accompanied by hypermotility and inflammation or gout or multiple sclerosis. *PCT Int. Appl.* (2008), 24pp. CODEN: PIXXD2 WO 2008087461 A2 20080724 AN 2008:888000 CAPLUS)

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

Hazai együttműködő intézmények: SZTE Gyógyszerkémiai Intézet, SZTE Orvosi Vegytani Intézet, SZTE Szerves Kémiai Tanszék, MTA-SZBK Biokémia Intézet, SZTE Neurológiai Klinika, ELTE Kémiai Intézet.

Külföldi együttműködő intézmények: Univ Turku, Univ Ghent, Univ Jouensuu, Univ. Jyväskylä, Univ. Potsdam.

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

A kutatócsoport kutatásait az Országos Tudományos Kutatási Alap (T048764, T049407, K72065, K75433) támogatta.

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

1. Martinek TA, Varga T, Balázsik K, Szöllösi Gy, Fülöp F, Bartók M, Enantioselective hydrogenation of ketopantolactone using Pt- $\beta$ -ICN chiral catalyst: correlation between the solution state concentration of a nucleophilic  $\beta$ -isocinchonine-ketopantolactone complex and the enantioselectivity. *J. Catal.* 255, 296-303 (2008)
2. Szöllösi Gy, Cserényi Sz, Fülöp F, Bartók M, New data to the origin of rate enhancement on the Pt-cinchona catalysed enantioselective hydrogenation of activated ketones using continuous-flow fixed-bed reactor system. *J. Catal.* 260, 245-253 (2008)
3. Szöllösi Gy, Hermán B, Felföldi K, Fülöp F, Bartók M, Up to 96% Enantioselectivities in the Hydrogenation of Fluorine. *J. Catal.* 260, 245-253 (2008)
4. Szöllösi Gy, Szóri K, Bartók M, Enantioselective hydrogenation of arecaidine over cinchona alkaloid-modified palladium catalyst: A novel route to enantioenriched nipecotic acid derivatives. *J. Catal.* 256, 349-352 (2008).
5. K, Szöllösi Gy, Bartók M, The enantioselective hydrogenation of 5,6-dihydro-2H-pyran-3-carboxylic acid over a cinchona alkaloid-modified palladium catalyst: Asymmetric synthesis of a cockroach attractant. *New J. Chem.* 32, 1354-1358 (2008)
6. Szatmári I, Reijo Sillanpää, Fülöp F: Microwave-assisted, highly enantioselective addition of diethylzinc to aromatic aldehydes catalyzed by chiral aminonaphthols. *Tetrahedron: Asym.*, 19, 612-617 (2008)
7. Kiss L, Forró E, Martinek TA, Bernáth G, Norbert De Kimpe, Fülöp F: Stereoselective synthesis of hydroxylated  $\beta$ -aminocyclohexanecarboxylic acids. *Tetrahedron*, 64, 5036-5043 (2008)
8. Szakonyi Zs, Hetényi A, Fülöp F: Synthesis and application of monoterpene-based chiral aminodiols. *Tetrahedron*, 64, 1034-1039 (2008)
9. Matthias Heydenreich, Andreas Koch, Szatmári I, Fülöp F, Erich Kleinpeter: Synthesis and conformational analysis of naphth[1,2-*e*][1,3]oxazino[4,3-*a*][1,3]isoquinoline and naphth[2,1-*e*][1,3]oxazino[4,3-*a*]isoquinoline derivatives. *Tetrahedron*, 64, 7378-7385 (2008)
10. Tasnádi G, Forró E, Fülöp F, An efficient new enzymatic method for the preparation of  $\beta$ -aryl- $\beta$ -amino acid enantiomers. *Tetrahedron: Asym.*, 19, 2072-2077 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

Átlagléttség <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			26
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			26
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	26
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	74,7	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	820
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			583
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	0	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	2	<i>ebből</i> külföldön:	2
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	3	posztterek száma <sup>10</sup> :	3
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			3
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát:	1
		PhD-t:	4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			300
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			27 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	13 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## SZTE SZUPRAMOLEKULÁRIS ÉS NANOSZERKEZETŰ ANYAGOK KUTATÓCSOPORT

Penke Botond, az MTA rendes tagja  
6720 Szeged, Dóm tér 8.  
Telefon: (62) 545-136, Fax: (62) 545-971  
e-mail: penke@mdche.u-szeged.hu

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

Szupramolekuláris fehérje aggregátumok szerkezete, neurotoxikus hatása és új neuroprotektív gyógyszerjelölt vegyületek kutatása

- Polipeptidek aggregációjának vizsgálata molekulamodellézési módszerekkel. Neuroprotektív hatású peptidomimetikumok tervezése és szintézise.
- ACE inhibitorok és új cinkion-kelátorok vizsgálata Alzheimer-kór modellekben
- A gyógyszerjelölt vegyületek in vitro és in vivo screenelése

Nanobiotechnológia: nanorészecskék szintézise, vizsgálata és biológiai alkalmazása

- Nemesfém monodiszperz nanorészecskék szintézise és biológiai alkalmazása
- Félvezető nanorészecskék szintézise
- Mikrokalometriás vizsgálatok nanorészecskékkel

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

Molekuladinamikai módszerekkel modellezték a  $\beta$ -amiloid 1-42 ( $A\beta_{42}$ ) oligomerjeinek szerkezetét. Az  $A\beta_{42}$  szálmódeljére dokkoltak egy nagy sorozat polipeptidet és mimetikumot, ezek közül a legjobbakat szintetizálták. Saját eredmények és nemrégiben megjelent vizsgálatok alapján a bradikinin B1 antagonisták csökkentik az amiloid béta hosszútávú memóriát romboló hatását. Ezeket az eredményeket felhasználva számítógépes modellezés segítségével kiválasztottak olyan molekulákat ebből a családból, amelyek jól kötődnek az amiloid béta fibrillum felszínére. Biológiai tesztek azt mutatták, hogy ezek között van hatásos molekula. (2 fős kutatócsoport; MTA-TKI; 6 Mft)

Mind in vitro, mind in vivo kísérletekkel bebizonyították, hogy az ingerületvezetés közben a szinapszisban a  $Zn^{2+}$  felszabadulás és újrafelvétel (reuptake) energiát igényel. Az öregedés előrehaladtával a  $Zn^{2+}$ -újrafelvétel lelassul, a szinaptikus résben maradó  $Zn^{2+}$ -ionok komplexálódnak az  $A\beta_{42}$ -höz, a képződő oligomerek hozzátapadnak a membránokhoz és gátolják a mitokondriumok működését. (Bűvös kör alakul ki: negatív visszacsatolás). In vivo-ex vivo kísérletekben, fiatal és öreg patkányokon megvizsgálták a Perindopril® hatását a  $Zn^{2+}$ -felszabadulásra és újrafelvételre (redisztribúció); az eredmények alapján készül a másodlagos szabadalom a fenti ACE-inhibitor alkalmazására az Alzheimer-kór gyógykezelésében (1 fő MTA-TKI; 4 Mft)

Az első pont szerint szintetizált vegyületeket neuroprotektív hatásra in vitro screenelték (MTT-teszt) majd megmérték a legjobb új vegyületek hatását élőben (in vivo elektrofiziológia; tanulási tesztek). Ezek a vegyületek az Alzheimer-kór potenciális gyógyszerei; a szabadalom összeállítását elkezdték (2 fő; 8 Mft)

Szférikus arany nanorészecskéket tartalmazó vizes közegű diszperziókat állítottak elő. A részecskeméretet az 5-15 nm-es tartományban az arany:citrát aránnyal szabályozhatók. A részecskék méreteloszlását dinamikus fényszórásméréssel és TEM felvételek alapján határozták meg. Vizsgálták a cisztein, LPFFD-OH pentapeptid és a Cys- $A\beta_{1-28}$  molekula kötődését az

arany nanorészecskék felületén az UV-Vis spektrumok alapján. Megállapították, hogy egy második plazmon rezonancia maximum jelenik meg a cisztein és az LPFFD-OH molekulák kapcsolódásának következtében. A Cys-A $\beta$ <sub>1-28</sub> molekula esetében az aranyra jellemző plazmon maximum tolódik el. Henger alakú arany nanorészecskék kontrollált szintézisét dolgozták ki vizes közegben, mely során a reaktánsok koncentrációját változtatva 8, 12 és 25 nm-es rudakat állítottak elő. A részecskék azonosítása UV-Vis spektrumaik plazmon rezonancia maximum értékeik alapján történt. Az LPFFD-OH pentapeptid és a Cys-A $\beta$ <sub>1-28</sub> molekula hozzáadásának hatására az arany nanorudak rezonancia maximum értékeinek intenzitása csökkent de eltolódás nem figyelhető meg. Arany és ezüst ötvözet nanorészecskék kontrollált szintézisét dolgozták ki vizes közegben, valamint vizsgálták a keletkezett részecskék alakját, méretét, méreteloszlását. Az ötvözet nanorészecskék felületét is módosították Cys, LPFFD-OH és Cys-A $\beta$ <sub>1-28</sub> molekulák felületi kapcsolásával. Megállapították, hogy az Au/Ag aránnyal befolyásolható a plazmon rezonancia maximumok értéke.

Optikai hullámvezető fénymódus spektroszkópiával (OWLS) különböző proteinek, (BSA, lizozim, papain, hemoglobin) szorpcióját tanulmányozták SiO<sub>2</sub> és TiO<sub>2</sub> nanorészecskékkel borított hullámvezető rétegeken. Vizsgálták, hogy miként függ a proteinek adszorpciója a közeg pH-jától, annak elektrolittartalmától és a szenzor szilános felületmódosításától. A módszer alkalmas peptid-peptid kölcsönhatás tanulmányozására. Ennek során béta-Amiloid 1-28 kötődését tanulmányozták áramlásos rendszerben. Az SiO<sub>2</sub> felületen a peptid adszorpciója már 3  $\mu$ g ml<sup>-1</sup> koncentrációnál jól detektálható. Kimutatták, hogy az immobilizált amiloid rétegében csak a gyengébben kötött molekulák deszorbeálódnak LPFFD pentapeptid hatására.

Izoterm titrációs mikrokolorimetria (ITC) mérésekkel citrátionokkal stabilizált arany szol és „LPFFD-OH” pentapeptid közötti kölcsönhatást tanulmányozták. A pentapeptid molekulák arany részecskék felületén bekövetkező adszorpciója miatt jelentkező entalpiaváltozástól következtek a kölcsönhatás jellegére. Kimutatták, hogy a pentapeptid igen gyenge kölcsönhatások révén kötődik az aranyrészecskék felületére, melyet a kötődési entalpia nagyságából állapították meg (értéke ~1-3 kJ/mol LPFFD-OH), ugyanakkor a rendszer teljes aggregációja is bekövetkezett. Megállapították, hogy az arany nanorészecskék felületén kötődő pentapeptid erőteljesen csökkenti a kolloid stabilitást.

A $\beta$ <sub>1-28</sub> peptid lánc kölcsönhatását vizsgálták pentapeptidekkel (LPFFD-OH és pentaglicin) és az entalpiaváltozások alapján megállapították, hogy a pentapeptidek gyengén kötődnek az amiloid- $\beta$ láncokhoz.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

- Kellermayer M.; SOTE –A $\beta$  fibrillumok szerkezete, stabilizálása
- Fülöp F, Martinek T.;SZTE-GYTK-NMR szerkezetvizsgálatok; kötésvizsgálatok
- Lévay Gy. EGIS Zrt. –ACE inhibitorok alkalmazása az Alzheimer-kórban
- Zrínyi M, SOTE BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék – Protein oldatok és gélek fizikai -kémiai tulajdonságainak vizsgálata
- P.G.M. Luiten, University of Groningen – A $\beta$  aggregáció szimulációs számítások
- M. Przybylski, University of Konstanz- A $\beta$  aggregáció tömegspektrometriás követése
- H. Busse, Fraunhofer Institute (IFAM) Bremen, – Félvezető és szenzorkutatások
- R. Schoonheydt, Catholic University Leuven – Protein adszorpciók kutatások rétegszilikátokon
- Datki Z, Szegedi V.; Bay Z. Intézet (Baygen) - In vitro és in vivo screenelés



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

- FP-7(projektszám 211696): LipiDiDiet Therapeutic and preventive impact of nutritional lipids on neuronal and cognitive performance in aging, Alzheimer's disease and vascular dementia (FP-7-Health-2007-A; collab. projekt) 60.000 Euro, 2008-2012.
- NKTH OM00165/2008 Pszichiátriai kórképekben és az azokat kísérő kognitív deficit terápiájában használható gyógyszerjelölt fejlesztése 20 MFt 2008-2012.
- OTKA K73307 Önszerveződő hibrid filmek előállítására nanoszerkezetű anyagokból. 27.491 MFt 2008-2011.
- Fraunhofer Institut (IFAM) Önszerveződő hibrid filmek előállítására nanoszerkezetű anyagokból. 1K845 60.000 Euro 2009-2011.

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

1. Szabo T, Mitea R, Leeman H, Premachandra GS, Johnston CT, Szekeres M, Dekany I, Schoonheydt RA, Adsorption of protamine and papain proteins on saponite, Clays and Clay Minerals, 56(5) 494-504 (2008)
2. Korosi L, Papp Sz, Menesi J, Illes E, Zoellmer V, Richardt A, Dekany I, Photocatalytic activity of silver-modified titanium dioxide at solid-liquid and solid-gas interfaces, Colloids and Surfaces A-Physicochemical and Engineering Aspects 319(1-3) 136-142 (2008)
3. Seboek D, Szendrei K, Szabo T, Dekany I, Optical properties of zinc oxide ultrathin hybrid films on silicon wafer prepared by layer-by-layer method, Thin Solid Films 516(10) 3009-3014 (2008)
4. Papp Sz. Patakfalvi R, Dekany I, Metal nanoparticle formation on layer silicate lamellae, Colloid and Polymer Science 286(1) 3-14 (2008)
5. Beke S, Giorgio S, Korosi L, Nanai L, Marine W, Structural and optical properties of pulsed laser deposited V2O5 thin films, Thin Solid Films 516(15) 4659-4664 (2008).
6. Eljárás veszélyes hulladékok és szennyezett talajok ártalmatlanítására, Dékány I. Patzkó Á. Gálfi M. Bulik L. MSZ 226295 (2008)
7. Kellermayer MSZ, Karsai A, Benke M, Soos K, Penke B: Stepwise dynamics of epitaxially growing single amyloid fibrils, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 105(1): 141-144 (2008).
8. Laczko I, Vass E, Soos K, Fulop L, Zarandi M, Penke B: Aggregation of A beta(1-42) in the presence of short peptides conformational studies, Journal of Peptide Science 14(6) 731-741 (2008)
9. Verdier Y, Foldi I, Sergeant N, Fulop L, Penke Z, Janaky T, Szucs M, Penke B: Characterization of the interaction between A beta 1-42 and glyceraldehyde phosphodehydrogenase, Journal of Peptide Science 14(6) 755-762 (2008).
10. Paragi G, Szajli E, Bogar F, Kovacs L, Guerra CF, Bickelhaupt FM: Hydrogen bonding of 3-and 5-methyl-6-aminouracil with natural DNA bases, New Journal of Chemistry 32(11) 1981-1987 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	6	Ebből kutató <sup>2</sup> :	6
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
			4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			28
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			28
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	26
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1	idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	68,29	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	391
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			322
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	1
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	2	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	1	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	7	posztterek száma <sup>10</sup> :	19
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			7
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	8	Diplomamunkát:	5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :		PhD-t:	4
			120
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			23,8 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	69,6 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	12,4 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,6 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	14,1 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			1
EU-forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	10,2 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	28,3 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## SZTE BIOSZERVETLEN KÉMIAI KUTATÓCSOPORT (TÁRSULT TAG)

Kiss Tamás, a kémiai tudomány doktora  
6720 Szeged, Dóm tér 7. Postacím: 6701 Szeged, Pf. 440.  
Telefon: 62-544-337, Fax: 62-420-505  
e-mail: tkiss @chem.u-szeged.hu, honlap: www.staff.u-szeged.hu/inorg/indexh.html

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

Biológiai fontosságú [VO(IV)- és Zn(II) és Cu(II)] komplexek oldategyensúlyi (pH-potenciometria) és szerkezeti (UV-Vis, multinukleáris NMR, EPR, CD spektrális) vizsgálata sajátosságuk leírása, átalakulásaik, biospeciációjuk megismerése, illetve enzimaktivitásuk tesztelése céljából.

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

*Inzulinutánczó vanádium- és cinkkomplexek biospeciációja.* Az antidiabetikus hatású fémkomplexek szérumbeli szállításával kapcsolatosan ismerteket tovább finomították az inzulinutánczó komplex hordozóliganduma és a szérum nagy molekulatömegű fehérjéje (elsősorban az albumin) közötti kölcsönhatás figyelembevételével. Megállapították azonban, hogy ezen kölcsönhatások nem befolyásolják azon alapvető tényt, hogy a VO(IV) komplexek elsődleges szállítója a transferrin, míg a Zn(II) komplexeké a szérum albumin. Az  $\alpha$ -makroglobulin koncentrációja olyan kicsiny (4-6  $\mu$ M) a szérumban, hogy az terápiás szintű Zn(II) szállításhoz nagyon hamar telítődik így a döntő mennyiségű fémiot az albumin fogja szállítani.

*Metalloenzimek funkcionális illetve szerkezeti modellezése.*

- Vizsgálták a 1,3,5-trideoxi-1,3,5-trisz(metilamino)-*cisz*-inositol (tmci) rézkomplexeit és azok foszfatáz aktivitását. A pH 8 körül képződő kétmagvú  $\text{Cu}_2\text{H}_3\text{L}$  komplex igen nagy hatékonysággal (közel hat nagyságrenddel gyorsítja meg) és szelektíven képes elősegíteni foszforsavmonoészterek hidrolízisét.
- Vizsgálták 1,4-bisz[(1,5,9-triazaciklododekán-3-iloxi)metil]benzol (L1) és az 1,3,5-trisz[(1,5,9-triazaciklododekán-3-iloxi)metil]-benzol (L2) zinc(II) komplexeit s azok RNáz aktivitását. Fémion felesleg esetén L1 kétmagvú, míg L2 hárommagvú komplexek kialakítására is alkalmas. Eredményeik szerint L1 kétmagvú cink(II) komplexe meglepően nagy stabilitással képes kötödni két szomszédos guanin bázishoz. Hidrolitikus hatása viszont épp két szomszédos guanin bázist tartalmazó szubsztrátok esetén (pl. 5'-GpG-3') a legkisebb. E szubsztrát hidrolízisét viszont jelentősen elősegíti az L2 hárommagvú cink komplexe. Ennek magyarázata, hogy két Zn-makrociklus alegység szelektíven megkötődik a két szomszédos guanin bázison, így a harmadik Zn-makrociklus ideális pozícióban van a hidrolízis elősegítéséhez.
- Előállították és vizsgálták az MMP13 enzim aktív centrumában lévő cinkkötő doménnal megegyező Ac-KAHEFGHSLGLDHSK-NH<sub>2</sub> peptid cink(II) és réz(II) komplexeit. Ennek a semleges pH-n képződő cink(II) komplexe mind szerkezeti, mind funkcionális szempontból, sőt az MMP inhibitor hidroxámsavakkal való kölcsönhatás szempontjából is jól modellezi az MMP enzimek aktív centrumát. A peptid pH 8-10 között képződő egymagvú réz(II) komplexei jelentős oxidáz aktivitással bírnak. A három szeparált His alegységnek köszönhetően a peptid akár három fémiot is oldatban képes tartani.

- Előállították a <sup>1</sup>HSHRDFQPVLHL-NH<sub>2</sub> peptidet, amely a tumor ellenes hatású humán endostatin fehérje cinkkötő N-terminális fragmensé. Tanulmányozták a peptid cink(II) és réz(II) komplexeit. A semleges pH-n egy {NH<sub>2</sub>, 3N<sub>im</sub>, COO<sup>-</sup>} koordinációjú ZnL komplex dominál az oldatban. Valószínűleg így köti a cinket az antiangiogén (s így rákellenes) hatású az N-terminális 25-mer peptid is. A peptid rendkívül nagy affinitással köti a réz(II) iont is, pH 5-10 között a {NH<sub>2</sub>, N<sup>-</sup>, N<sup>-</sup>, N<sub>im</sub>} koordináció egyeduralgadó az oldatban. Ez a megfigyelés biológiai szempontból is releváns lehet, hiszen a réz(II) jelentős szerepet játszik az angiogenezisben, koncentrációjának csökkentése gátolja a véredények képződését.
- A 2008-ban publikált, *H. ducreyi* Cu,Zn-SOD enzim N-terminális fragmensével kapcsolatos vizsgálatok folytatásaként előállították az *A. pleuropneumoniae* Cu,Zn-SOD-jának hasonló N-terminális peptidjét (HADHDHKK-NH<sub>2</sub>), és vizsgálták réz(II) és cink(II) kötő képességét. Eredményeik szerint, annak ellenére, hogy ez a szekvencia egy His alegységgel kevesebbet tartalmaz, egy nagyságrenddel erősebben köti a réz(II) iont ( $K_{D,Cu} = 4.6 \times 10^{-13}$  M), mint az analóg *H. ducreyi* Cu,Zn-SOD fragmens. Ez a rendkívüli fémion-affinitás hasonló a réztartalmú bakteriális metalloproteinekéhez. Így az eredmények alátámasztják azt a feltételezést, hogy ez a rövid, hisztidinben gazdag N-terminális szakasz 'chaperon'-ként működve szerepet játszik a fehérje rézfelvételében fémionban szegény körülmények között, ill. fémion-csapdaként működve azok megtartásában. Ugyanakkor a cink(II) ionokhoz több mint két nagyságrenddel kisebb affinitást mutat ( $K_{D,Zn} = 4.8 \times 10^{-7}$  M), mint a *H. ducreyi* Cu,Zn-SOD fragmensé.
- A multihisztidin tartalmú aktív centrumok modellezése céljából előállítottak két elágazó láncú peptidet ((NH<sub>2</sub>-His)<sub>4</sub>-(Lys)<sub>2</sub>-Lys-CONH<sub>2</sub> és (N-Ac-His)<sub>4</sub>-(Lys)<sub>2</sub>-Lys-CONH<sub>2</sub>). E peptidek képesnek bizonyultak két ekvivalens fémion (réz(II) és cink(II)) megkötésére is pH ~ 7 körül, anélkül, hogy amid-nitrogén deprotonálódott volna. Bár e komplexek rendelkeznek DNáz aktivitással, az szerénynek mondható. Azonban az ilyen típusú ligandumok számtalan lehetőséget kínálnak a donorumok számának és minőségének változtatására, így további ligandumok előállítását tervezik egyéb funkciós csoportok beépítésével.
- Bár a 2007-ben előállított Ub-HNH fúziós fehérjéről igazoltuk cinkkötő képességét, a DNS-kötő és hidrolitikus kísérletekben ez a fehérje nem bizonyult aktívnak. Ezért olyan eljárást dolgoztak ki, amelyben az Ub-HNH fehérjét és a proteázt külön-külön kifejezve, tisztítás után a sejten kívül végezték el a proteolitikus hasítást. Ezzel a módszerrel sikeresen előállították magát a HNH fehérjét, majd a cink(II) kötését is igazolták. Ezután fluorimetriás, valamint gél-shift és nukleáz tesztekben vizsgálták hatását a DNS-re. Eredményeik azonban ismét negatívnak bizonyultak. Hogy a HNH peptid, bár a megfelelő szerkezetet mutatja, mégsem működőképes, valószínűleg annak tudható be, hogy nem köt a DNS-hez. Ezért előállították a HNH motívumot a C-terminális részén tartalmazó Cole7 nukleáz domén 6 különböző mutáns változatát, melyek részben vagy egészben tartalmazták magát a nonspecifikus DNS-kötő helyet is. Azonban csak a teljes méretű doménnel sikerült nukleáz aktivitást kimutatni. Mivel az egyik mutáns egyetlen aminosav cseréjével készült a fehérje N-terminális részen, arra a következtetésre jutottak, hogy ezen aminosav megléte esszenciális az enzim működése szempontjából, és egyben allosztérikus kontrollt is jelent. E lehetőséget kihasználva tervezik a továbbiakban egy biztonságos, biotechnológiai vagy terápiás célokra is használható mesterséges nukleáz előállítását, mely már részleges proteolízis hatására is elveszíti aktivitását, így várhatóan nem lesz képes nonspecifikus hasítások révén a sejtet elpusztítani.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A COST munkacsoportokban folyó kutatásaink sikeresen befejeződtek, de folytatódtak együttműködéseink számos hazai és külföldi kutatócsoporttal, így például a DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékével (Sóvágó Imre), és az MTA Kémiai Kutatóközpontjával (Rockenbauer Antal), a Thesszaloniki Egyetem Kémia Tanszékével (Prof. A Salifoglou), a Lisszaboni Műszaki Egyetem Kémia Tanszékével (Prof. J. Costa Pessoa), a Kiotói Gyógyszerészeti Egyetem Analitikai és Bioszervetlen Kémiai Tanszékével (Prof. H. Sakurai), a Hamburgi Egyetem Kémiai Tanszékével (Prof. D. Rehder), a Henri Poincaré Egyetem (Nancy) Kémiai Tanszékével (Prof. P. Rubini) és a Fort Collins-i Colorado Egyetem Kémiai Tanszékével (Prof. D. Crans) és a Padovai Egyetem Kémiai Tanszékeivel (Profs. Roberta Bertani, Valerio di Marco). Új kapcsolatként jelentkezett a Prof Bernhard Keppler kutatócsoportjával a bécsi Egyetemen kiépített kétoldalú egyezményrel is megerősített kapcsolat, illetve egy új valószínű elfogadás előtt álló COST együttműködés. Sajnos az EU fp-7 programjában beadott projektünk nem kapott támogatást.

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

Tovább folytatódott munkánk a korábban elnyert OTKA (3), NKTH (1) és OECD (1) projektekben. Sikeresen befejeződött egy Marie-Curie pályázatunk egy fiatal kutatónk hazatérésével kapcsolatosan egy fiatal munkatársunk pedig 2 éves Marie-Curie post doc pályázattal a Frankfurti Egyetemen elkezdte munkáját. A kutatócsoport anyagi támogatásának megszűnésének következtében további három munkatársunk távozott más hazai kutatóhelyekre, így a társult kutatócsoport ma már nem hivatalosan is csak az 1 fő „hivatalos” vezetőre és a korábbi 2 fő nem kutatócsoportti résztvevő kollegára csökkent és a velük együtt dolgozó fiatalok munkájára épül.

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

1. Nikolakis, VA; Tsalavoutis, JT; Stylianou, M; Evgeniou, E; Jakusch, T; Melman, A; Sigalas, MP; Kiss, T; Keramidas, AD; Kabanos, TA; Vanadium(V) Compounds with the Bis-(hydroxylamino)-1,3,5-triazine Ligand, H(2)bihyat: Synthetic, Structural, and Physical Studies of [(V2O3)-O-V(bihyat)(2)] and of the Enhanced Hydrolytic Stability Species cis-[(VO2)-O-V(bihyat)](-) *Inorganic Chemistry* 47 (24): 11698-11710 DEC 15 2008
2. Q Wang, E Leino, A Jancsó, I Szilágyi, T Gajda, E Hietamaki, H Lönnberg: Zn<sup>2+</sup> complexes of di- and tri-nucleating azacrown ligands as base moiety selective cleaving agents of RNA 3',5'-phosphodiester bonds: binding to guanine base, *Chembiochem*, 9, 1739-1748 (2008).
3. Zoltán Paksi, Attila Jancsó, Francesca Pacello, Nóra Nagy, Andrea Battistoni, Tamás Gajda: Copper and zinc binding properties of the N-terminal histidine-rich sequence of Haemophilus ducreyi Cu,Zn superoxide dismutase, *J. Inorg. Biochem.* 102, 1700-1710, 2008.
4. N.I. Jakab, A. Jancsó, T. Gajda, B. Gyurcsik, A. Rockenbauer: Copper(II), nickel(II) and zinc(II) complexes of N-acetyl-His-Pro-His-His-NH<sub>2</sub>: equilibria, solution structure and enzyme mimicking *J. Inorg. Biochem.* 102, 1438-1448 (2008).

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport (Társult tag)

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	3	Ebből kutató <sup>2</sup> :	<b>3</b>
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			19
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			19
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	19
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	51,204	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	276
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			249
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	1
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	1	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	5	poszterek száma <sup>10</sup> :	8
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			3
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	8	Diplomamunkát:	3
		PhD-t:	2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			970
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			0 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	0	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	39,5 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4,5 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

## SZTE REAKCIÓKINETIKAI KUTATÓCSOPORT (TÁRSULT TAG)

Kiss János, az MTA doktora  
6720 Szeged, Dóm tér 7.  
Telefon: (62) 544-803, Fax: (62) 420-678  
e-mail: jkiss@chem.u-szeged.hu

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

A kutatóegység két egymással szorosan összefüggő témakörben, nevezetesen a felületkémia és heterogén katalízis területén végez kutatásokat. A tématerület kapcsolódik az MTA 2007–2011 évekre meghirdetett téma prioritásaihoz, nevezetesen a kémiai anyagvizsgálat területéhez.

A program elsődleges célja a szénhidrogének értékesebb vegyületekké történő átalakítása, alkánok, alkének és alkil-aromás vegyületek előállítása. Intenzív kutatásokat tervezünk az alkoholok hasznosítására: elsősorban üzemanyagként, H<sub>2</sub> forrásként és tüzelőanyag cellában történő alkalmazásra. A reakció optimális feltételeinek megállapítása, a hatásos katalizátorok előállítása a katalizátorok spektroszkópiai jellemzése képezi a kutatás célkitűzését.

A katalitikus folyamatok megértése érdekében cél a szilárdtestek, beleértve fém-egy kristályok, orientált felületű oxidok, karbidok, bimetallikus rendszerek, polikristályos rendszerek szerkezetének, topográfiájának megismerése, ezeken a felületeken végbemenő adszorpciós folyamatok, az adszorbátumok stabilitásának, reakcióképességének tanulmányozása. Nanotechnológiai eljárásokkal kétdimenziós modellkatalizátorokat állítunk elő. Elektron-, ion- és fotoelektron spektroszkópiai módszerekkel, valamint STM-el vizsgáljuk a nanoklaszterek tulajdonságait.

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

Jelentősnek látszó eredményt értek el a Mo<sub>2</sub>C katalitikus és felületi sajátosságainak vizsgálatában. A szén hordozó felületén létrehozott Mo<sub>2</sub>C nanorészecskék kitűnő, a nemesfémeknél aktívabb és stabilisabb katalizátornak bizonyultak az etanolból, metanolból és a dimethyl etherből történő hidrogén előállításában. A Mo<sub>2</sub>C/Mo(100) felületen végzett elektron-spektroszkópiai módszerekkel feltárták a reakciók primér lépéseit és a felületen képződő gyökök átalakulásának irányát.

Elektron- foton- és ion spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-el tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek képződését és fizikai-kémiai sajátosságait egykristály titán-dioxid felületen. Az arany mellé olyan koadszorbeált fémet kerestek, mely az arany nanoméretű stabilitását különböző gázok jelenlétében valamint hőkezelés hatására is megőrzi. A Mo adatom elősegítette az arany nanoklaszterek szétszakadását: a képződött 2-3 nm-es aranyrészecskék 700 K-ig megmaradtak. A Rh adatom szintén stabilizálta az aranyat nanoméretben, de a Mo-tól eltérően elsősorban nem az Au részecskék szétszakadását promtálta, hanem a nanoklaszter térfogatát növelte meg. Ennek eredményeképpen az arany vált dominánssá a felületen.

Mindezek az eredmények energetikai szempontból hasznosíthatók.

### III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Téma címe: Karbid katalizátorok vizsgálata

Egyezmény neve: Magyar-argentín TÉT

Eredmények: Spektroszkópiai eredmények és ezek elméleti kiértékelésének kialakítása, a projekt elfogadása 2007 őszén történt.

Együttműködő partnerintézmény neve: Departamento de Física – Universidad Nacional del Sur, Buenos Aires, Argentína

Közös publikációk száma: 1

A kutatócsoport részt vesz a SZTE oktató munkájában, beleértve PhD-hallgatók képzését is. A kutatócsoport vezetője alapító tagja a SZTE Kémiai Doktori Iskolának. Műszerparkjukat a kutatási feladatok elvégzése mellett az egyetem hallgatóinak képzésében is igénybe veszik. A kutatócsoport tagja a KNRET pályázat által támogatott SZTE által koordinált Környezetvédelmi és Nanotechnológiai Tudáscentrumnak.

Szoros tudományos kapcsolatot ápol berlini Frei Universitat Fizika Intézetével, a berlini Fritz-Haber Intézettel és a Cseh Akadémia Fizika Intézetével.

Az MTA és a Román Akadémia kétoldalú egyezményes szerződés keretében kooperációban vagyunk a temesvári Műszaki Egyetemmel.

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

A kutatócsoport 2 OTKA, egy KNRET és egy OMFB (TÉT) nemzetközi pályázat feladatainak teljesítésén munkálkodott.

- NKTH-OTKA (K 69200) keretében katalitikus és gázszenzorikai 2D modellrendszerek nanoléptékű tanulmányozása.
- OMFB TÉT (ARG-14/06) Magyar-Argentín TÉT pályázat keretében szénhidrogének és alkoholok reakciójának katalitikus és felületkémiai vizsgálata folyik.
- NKTH-KPI (RET-07/2005) pályázat keretében pedig fotoelektromosan aktív nanoszerkezetek tanulmányoznak.
- OTKA (NI 69327) A témavezető és csoportja részt vesz a 2007-ben elnyert pályázaton, melynek témája a szénhidrogének és alkoholok reakciójának vizsgálata.

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

1. Barthos R, Széchenyi A, Solymosi F: Efficient H<sub>2</sub> Production from Ethanol over Mo<sub>2</sub>C/C Nanotube Catalyst, Catalysis Letters, 120, 161-165 (2008)
2. Kovács I, Kiss J, Solymosi F: The adsorption properties of PdZn<sub>x</sub> alloy on Pd(100): preparation and characterization, Vacuum, 82, 182-185 (2008)
3. Berkó A, Kiss AM, Švec M, Šutara F, Cháb V: Ar<sup>+</sup> assisted carbidization of TiO<sub>2</sub>(110) supported Mo nanoparticles, Vacuum, 82, 125 (2008)
4. Bugyi L, Berkó A, Óvári L, Kiss AM, Kiss J: Enhanced dispersion and stability of gold nanoparticles on stoichiometric and reduced TiO<sub>2</sub>(110) surface in the presence of molybdenum, Surface Science, 602, 1650-1658 (2008)



5. Óvári L, Bugyi L, Majzik ZS, Berkó A, Kiss J: Surface Structure and Composition of Au-Rh Bimetallic Nanoclusters on TiO<sub>2</sub>(110): a LEIS and STM study, *Journal of Physical Chemistry C*, 112 (46), 18011-10816 (2008)
6. Mutombo P, Kiss AM, Berkó A, Cháb V: Atomic Geometry and STM stimulations of TiO<sub>2</sub>(110) surface upon formation of oxygen vacancy and a hydroxyl group, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 16 (2), Art. Number: 025007 (2008)
7. Juan A, Pistonesi C, Farkas AP, Solymosi F: DFT study of methanol adsorption and dissociation on  $\beta$ -Mo<sub>2</sub>C(001), *Surface Science*, 602, 2206-2211 (2008)
8. Farkas AP, Koós Á, Bugyi L, Solymosi F: Adsorption and reaction of methyl and ethyl iodide on potassium-promoted Mo<sub>2</sub>C/Mo(100) surface, *Journal of Physical Chemistry C*, 112, 18502-18509 (2008)
9. Farkas AP, Solymosi F: Adsorption and reactions of dimethyl and diethyl ethers on Mo<sub>2</sub>C/Mo(100), *Surface Science*, 602, 1497-1506 (2008)
10. Farkas AP, Solymosi F: Effects of potassium on the adsorption and dissociation pathways of methanol and ethanol on Mo<sub>2</sub>C/Mo(100), *Surface Science*, 602, 1475-1485 (2008)
11. Koós Á, Barthos R, Solymosi F: Reforming of methanol on a K-promoted Mo<sub>2</sub>C/Norit catalyst, *Journal of Physical Chemistry C*, 112, 2607-2612 (2008)
12. Kecskeméti A, Barthos R, Solymosi F: Aromatization of dimethyl and diethyl ethers on Mo<sub>2</sub>C-promoted ZSM-5 catalysts, *Journal of Catalysis*, 258, 111-120 (2008)
13. Solymosi F, Barthos R, Kecskeméti A: The decomposition and steam reforming of dimethyl ether on supported Mo<sub>2</sub>C catalysts, *Applied Catalysis A General*, 350, 30-37 (2008)
14. Óvári L, Schwarz J, Peters MV, Hecht S, Wolf M, Tegeder P: Reversible Isomerization of an Azobenzene Derivative Adsorbed on Au(111): Analysis Using Vibrational Spectroscopy, *International Journal of Mass Spectrometry*, 277, 223-228 (2008)

## VI. A kutatóhely 2008. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA-SZTE Reakciókinetikai Kutatócsoport (Társult tag)

Átlaglétszám <sup>1</sup> :	13	Ebből kutató <sup>2</sup> :	7
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:		levelező tag:	0
		rendes tag:	1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma <sup>3</sup> :			14
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma <sup>4</sup> :			14
<i>Ebből</i> impakt fakt. publ. térkép magyarul:	0	idegen nyelven:	14
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0	idegen nyelven:	0
összesített impakt faktor <sup>5</sup> :	35	összes hivatkozás száma <sup>6</sup> :	286
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			147
<i>Magyarul</i> könyv <sup>7</sup> /atlasz:	0	könyvfejezet:	0
<i>Idegen</i> nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése <sup>8</sup> : PhD:	2	MTA doktora:	0
		levelező tag:	0
		rendes tag:	0
Elfogadott találmányok, szabadalmak száma <sup>9</sup> :	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma <sup>10</sup> :	12	poszterek száma <sup>10</sup> :	2
Tanácsadói tevékenységek száma <sup>11</sup> :			0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma <sup>12</sup> :			3
TDK-munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát:	0
		PhD-t:	3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma <sup>13</sup> :			40
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege <sup>14</sup> :			0 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma <sup>15</sup> :	1	Teljes saját bevétel <sup>16</sup> :	24 MFt
Saját szabadalmi, know how és szerzői jogi bevétel <sup>17</sup> :			0 MFt
Az év folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13 MFt
Az év folyamán művelt NKTH-pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	10 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
NFT-témák száma <sup>18</sup> :	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nemzetközi pályázati forrásból művelt témák száma <sup>19</sup> :			0
EU-forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány <sup>20</sup> :			0 MFt

